

Rainer Rindworm
Diss. Frankfurt a/Main
1983

*Vielteilchentheorie der durch Elektronen
assistierten Exzitonrekombination*

Inaugural-Dissertation

zur

Erlangung des Doktorgrades der Naturwissenschaften

vorgelegt beim Fachbereich Physik

der

Johann Wolfgang Goethe-Universität

in Frankfurt am Main

von

Rainer Lindwurm

aus Frankfurt/Main

Frankfurt/Main

Oktober 1983

Gedruckt mit Genehmigung des Fachbereichs Physik der
Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main

Dekan:

Prof. Dr. F. Granzer

1. Berichterstatter:

Prof. Dr. H. Haug

2. Berichterstatter:

Prof. Dr. C. Klingshirn

Tag der Promotion:

22.12.1983

INHALTSVERZEICHNIS

1. Einleitung	1
1.1 Hochanregung und stimulierte Rekombinationen	1
1.2 Inhalt und Aufbau der Arbeit	9
2. Zur dielektrischen Funktion	13
2.1 Greensche Funktionen der makroskopischen Maxwell-Gleichungen	13
2.2 Dielektrische Funktion und retardierter Kommutator	16
2.3 Dielektrische Funktion und Photon-Selbstenergie	18
3. Modell des hochangeregten exzitonischen Halbleiters	21
3.1 Der Hamiltonoperator	21
3.2 Die Greenschen Funktionen	39
4. Die gekoppelten Gleichungen	49
4.1 Methoden zur Berechnung Greenscher Funktionen	49
4.2 Photon- und Exziton-Einpunktfunktion	53
4.3 Elektron-, Photon- und Exziton-Greensche Funktion	58
4.4 Das Gleichungssystem des hochangeregten Halbleiters	63
4.5 Berechnung der Vertex-Funktionen	71
5. Optische Spektren	79
5.1 Das Polariton	79
5.2 Elektronassistierte Exzitonrekombination	86
5.3 Experimentelle Messmethoden	94
5.4 Vergleich der Spektren	97
5.4 Verstärkungsfunktion und Absorptionskoeffizient	104

6. Zusammenfassung	107
--------------------	-----

7. Referenzen	109
---------------	-----

8. Anhang	115
-----------	-----

8.1 AI	115
--------	-----

8.2 AII	116
---------	-----

1.1 HOCHANREGUNG UND STIMULIERTE REKOMBINATIONEN

Ein Teilgebiet der heutigen Festkörperphysik beschäftigt sich mit den optischen Übergängen der Elektron-Loch-Paaranregungen im hochangeregten Halbleiter. Die verschiedenen Übergänge manifestieren sich in optischen Spektren. Aufgabe der Theorie ist es, die auftretenden Linien und Banden zu berechnen und bestimmten mikroskopischen Prozessen zuzuordnen. Auf diese Weise wird eine immer klarere Vorstellung über Struktur und Verhalten der Materie gewonnen.

Das Bild, das wir uns von einem Halbleiter machen, ist geprägt von dem Bändermodell, in dem die Valenzelektronen der einzelnen Atome dem gesamten Kristall zugeordnet sind. Sie bewegen sich im periodischen Potential der Ionenrümpfe, was zum Auftreten von Bändern führt. Bänder sind Bereiche erlaubter Energiezustände, die von Elektronen besetzt werden können, die durch Lücken, Bereiche verbotener Energiezustände, getrennt sind. Die Beschreibung eines Halbleiters geschieht in einfachster Näherung durch ein Zweibandmodell, bei dem nur Valenz- und Leitungsband betrachtet wird. Elektronen, die sich im Leitungsband befinden, bewegen sich fast frei durch den Kristall und tragen zur Stromleitung bei. Dieses Modell liefert so gesehen eine Möglichkeit zur Klassifizierung der Materie. Materialien mit besetztem Leitungsband heißen Leiter. Materialien mit leerem Leitungsband werden Nichtleiter genannt. Im Grundzustand besitzt ein Halbleiter ein leeres Leitungsband und ein volles Valenzband, so daß er für $T=0$ ein Nichtleiter ist. Jedoch ist die Lücke bei Halbleitern nicht sehr groß (CdS 2.582 eV, ZnO 3.436 eV), und oft durch Störstellen

oder Dotierungen stark modifiziert. Dadurch kommt es bei endlichen Temperaturen zu Übergängen ins Leitungsband. Dieses Verhalten war der Anlaß, solche Materialien Halbleiter zu nennen.

Durch Zuführen von Energie, z.B. elektromagnetische Strahlung kann ein Halbleiter aus dem Grundzustand gebracht werden. Der einfachste Anregungszustand ist der Übergang eines Elektrons aus dem Valenzband ins Leitungsband. Die Leerstelle (Loch), die im Valenzband zurückbleibt, verhält sich wie ein Quasiteilchen mit positiver Ladung und geht mit dem Elektron im Leitungsband einen gebundenen Zustand ein, der als Exziton bezeichnet wird. Dieses Exziton besitzt ein wasserstoffähnliches Spektrum, das unterhalb der Leitungsbandkante liegt. Es stellt den tiefst möglichen Anregungszustand eines Halbleiters dar. Werden weitere Elektronen aus dem Valenzband ins Leitungsband gebracht, so relaxieren diese durch (nicht-strahlende) Streuprozesse z.B. mit Gitterschwingungen (Phononen) bis in das tiefste Exzitonenniveau und besetzen dieses thermisch. Da das Exziton selbst ein angeregter Zustand ist, zerfällt es nach einer gewissen Zeit (z.B. CdS 10^{-9} - 10^{-10} sec [1]), und die freiwerdende Energie verlässt als Photon den Kristall. Aus diesem Grund dominiert bei kleiner Anregungsdichte Lumineszenzlicht, das von Exzitonen herrührt. Wird ein solches Lumineszenzspektrum von CdS betrachtet (siehe Abb.1a [2]), so fallen bei einer Anregungsdichte von $I^{\text{exc}} = 2 \text{ mWcm}^{-2}$ zwei Linien ins Auge, die von an Störstellen gebundenen Exzitonen herrühren.

I_1 (2.537 eV) gehört zur Rekombination eines an einen neutralen Akzeptor gebundenen Exziton, während I_2 (2.546 eV) die Rekombination eines an einen neutralen Donator gebundenen Exziton darstellt. Erhöhung der Anregungsdichte um einige Größenordnungen ändert nichts Wesentliches an diesem Spektrum. Erst oberhalb einer Anregungsdichte von $I^{\text{exc}} \geq 10 \text{ kWcm}^{-2}$ kommt es zu einer neuen Erscheinung, die als M-Bande bezeichnet wird. Weitere Erhöhung der Anregungsdichte führt zu einer Ausdehnung der

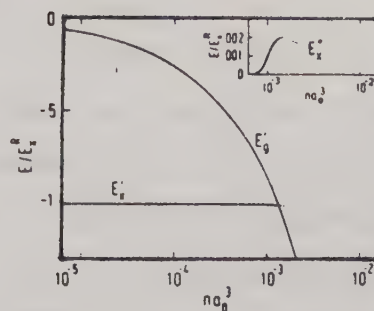
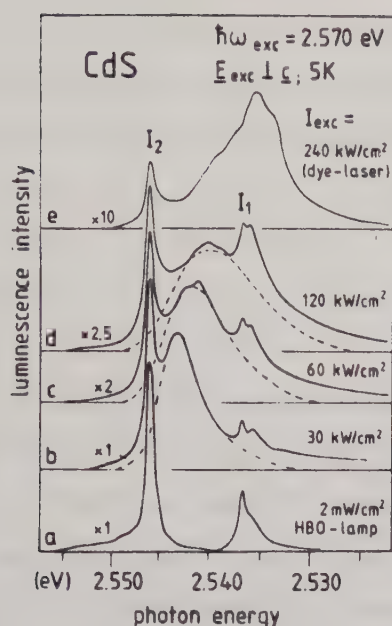


Abbildung 1. 1a) Lumineszenzspektrum von CdS [2]

1b) Dichteabhängigkeit der Lückenenergie [13]

M-Bande, bis sie bei $I^{\text{exc}} = 240 \text{ kWcm}^{-2}$ die I_2 -Linie vollständig absorbiert. Art und Form der M-Bande können sich von Material zu Material unterscheiden, jedoch ist allen Halbleitern gemeinsam, daß es bei zunehmender Anregungsintensität zu prinzipiell neuen Emissionslinien und Banden kommt. Es ist naheliegend, das Auftreten dieser neuen Strukturen dadurch zu erklären, daß die Dichte der elementaren Anregungen in den einzelnen Bändern stark zugenommen hat. Wechselwirkungen der elementaren Anregungen untereinander sind nicht mehr zu vernachlässigen, und es kommt zu einer Menge neuer Übergänge, die sich in den veränderten Spektren offenbaren. Starke Wechselwirkungen der elementaren Anregungen können sogar zu ganz neuen Elementaranregungen führen. Erwähnt sei hier das Exzitonmolekül [3-5] auch Biexziton genannt, und das Elektron-Loch-Plasma [6-9] Die Veränderungen des Lumineszenzspektrums bei zunehmender Anre-

gungsintensität ermöglicht die Definition eines hochangeregten Halbleiters [10]. Ein Halbleiter wird als hochangeregt bezeichnet, wenn durch optische Übergänge oder durch Elektronenbeschuß die Dichte der Elementaranregungen so hoch ist, daß die Wechselwirkungen unter ihnen nicht mehr vernachlässigt werden dürfen.

Der hochangeregte Halbleiter kann nun noch einmal in zwei prinzipielle Regimes eingeteilt werden, für die sehr verschiedene Beschreibungsweisen notwendig sind. Der eine Grenzfall ist das exzitonische System, bei dem ein Großteil der elementaren Anregungen als gebundene Elektron-Loch-Paare (Exzitonen) vorliegen. Diese Betrachtungsweise ist zutreffend bei Halbleitern mit relativ großer Exzitonbindungsenergie und kleinem Bohrschen Radius. Dabei soll der Bohrsche Radius aber noch wesentlich größer sein als die Gitterkonstante des Kristalls, damit die Wannierformulierung des Exzitons [11,12] verwendet werden kann. Vertreter dieser Gruppe sind die II-VI Verbindungen und die Kupferhalogenide, bei nicht zu großer Anregungsdichte (z.B. CdS, ZnO, CuCl).

Weitere Erhöhung der freien Ladungsträgerkonzentration verursacht eine starke Absenkung der Bandkante (siehe Abb.1b [13]). Erreicht das Leitungsband die Exzitonlinie, hört der gebundene Zustand auf zu existieren, und das System liegt als Elektron-Loch-Plasma vor. Die Beschreibung eines solchen Systemes ist bestimmt durch die freien Ladungsträger (Elektronen und Löcher) und deren Wechselwirkungen. Getrennt sind beide Bereiche durch das Mott-Kriterium, das angibt bei welcher freien Ladungsträgerdichte der Übergang vom exzitonischen System zum Elektron-Loch-Plasma stattfindet. Für CdS liegt die Mottdichte etwa bei $n_e = 3 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Die Beschreibung beider Teilgebiete gemeinsam ist äußerst schwierig, da für den Übergangsbereich weder das Exzitonbild noch das Elektron-Loch-Bild adäquat ist. Gelöst werden konnte dieses Problem von Schmitt-Rink, Löwenau und Haug [14-16] durch numerische Matrixinversion der

Bethe-Salpeter-Gleichung, in der die zwei Hauptaspekte konsistent berücksichtigt werden. Die bindende Coulombsche Wechselwirkung wird als Leiternäherung in die Bethe-Salpeter-Gleichung des Elektron-Loch-Paares eingebaut, was im Niederdichtegrenzfall auf das Exziton führt. Die Abschirmung wird durch eine Intraband-dielektrische Funktion in RPA-Näherung berücksichtigt. Dieser Beitrag dominiert im Hochdichtegrenzfall, und verursacht das Elektron-Loch-Plasma.

Ein anderer Aspekt des hochangeregten Halbleiters ist das Auftreten stimulierter Emission einzelner Übergänge. Das Interesse am Verständnis der stimulierten Emission löste eine Vielzahl von Untersuchungen aus. Haug [26] zeigte, daß stimulierte Emission in Exzitonensystemen dann möglich ist, wenn ein anderer Streupartner am optischen Übergang beteiligt ist. Im Bereich des exzitonischen Halbleiters werden folgende Rekombinationsprozesse diskutiert [10], die zu stimulierter Emission führen.

1. $e - x$ Elektron - Exzitonrekombination

2. $h - x$ Loch - Exzitonrekombination

3. $x - x$ Exziton - Exzitonrekombination

4. $MLO - x$ LO-Phonon - Exzitonrekombination
($M=1,2,\dots$ Anzahl der emittierten
Phononen)

5. m_1, m_t Exzitonmolekül Zerfallsprozesse

Allen fünf Prozessen gemeinsam ist die Streuung eines 1s-Exzitons unter gleichzeitiger Energieabgabe an den beteiligten Streupartner. Die Emissionsbanden liegen daher unterhalb der Exzitonresonanz. Je nach Prozeß 1.-5. sind die Streupartner Elektronen, Löcher, Exzitonen, [17-24] LO-Phononen [25-27] oder Exzitonmoleküle [28-30] .

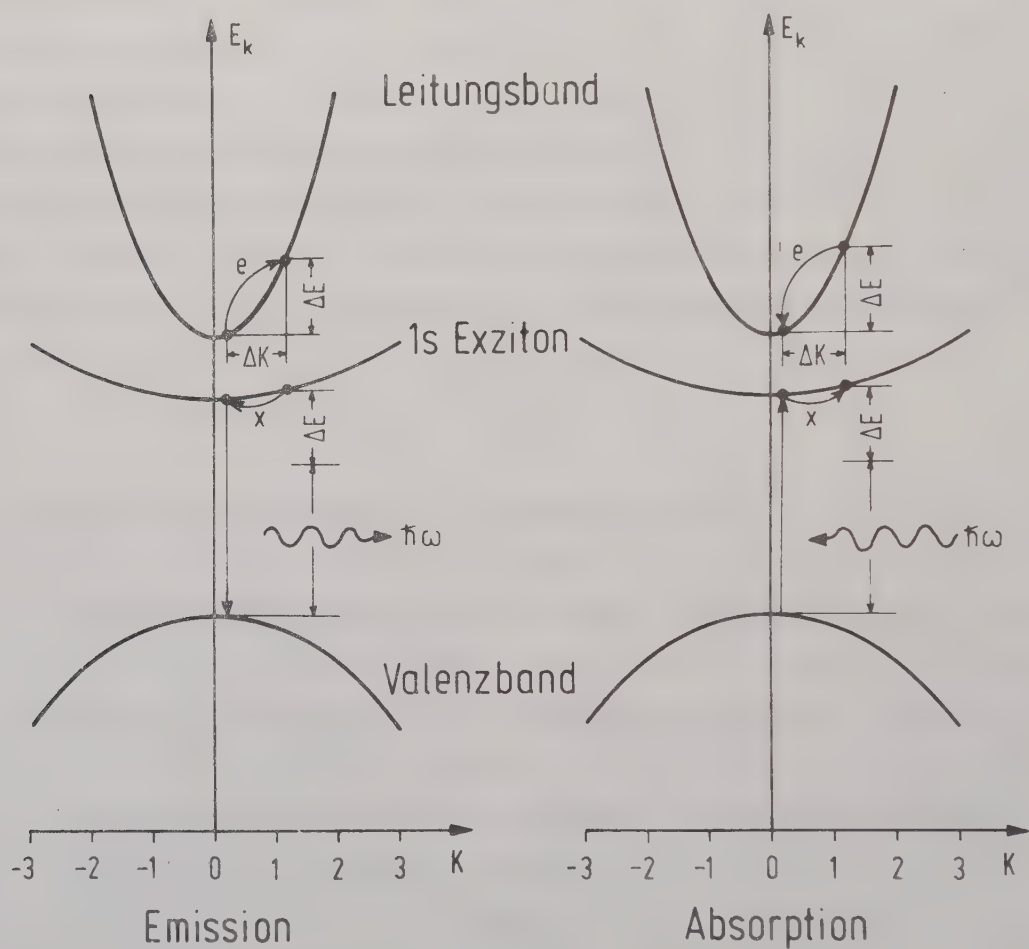


Abbildung 2. Elektronassistierte Exzitonrekombination

In Abbildung 2 ist der Mechanismus der stimulierten Emission graphisch veranschaulicht. Stellvertretend für die 5 Prozesse wird die Elektron-Exzitonrekombination herausgegriffen.

Der Beitrag der Elektron-Exzitonrekombination zu Emission und Absorption, wird erstmals von Benoit a la Guillaume et al [17] untersucht. Zur Bestimmung der Übergangsrate werden die Übergangswahrscheinlichkeiten der in Abb.2 angegebenen Prozesse in Störungstheorie II.Ordnung berechnet. Dabei zerfällt die Emissionswahrscheinlichkeit

$$P_E \sim (1 + N(\omega)) n_k^x n_q^e (1 - n_{k+q}^e)$$

$N(\omega)$ ist die Anzahl der Photonen im Zustand mit Frequenz ω .

n_k^x ist die (Boltzmann)-Verteilungsfunktion der Exzitonen.

n_q^e ist die (Boltzmann)-Verteilungsfunktion der Elektronen.

in einen stimulierten Anteil $\sim N(\omega)$ und einen spontanen Anteil ~ 1 . Wird die Absorptionswahrscheinlichkeit

$$P_A \sim N(\omega) (1 + n_k^x) (1 - n_q^e) n_{k+q}^e$$

vom stimulierten Anteil der Emission abgezogen und über alle möglichen Übergänge summiert, so erhält man die totale stimulierte Übergangsrate in einen Photonzustand mit der Frequenz ω .

$$g(\omega) = \sum_{kq} U(k,q) [-(1+n_k^x) n_{k+q}^e + (n_k^x + n_{k+q}^e) n_q^e]$$

Das Matricelement U enthält, durch die Berechnung in Störungstheorie II.Ordnung, die ungestörten Energiedifferenzen von Photon und Exziton im Nenner. Dadurch kommt es für höhere Temperaturen zu Divergenzen in den zu berechnenden Spektren. Diese Divergenzen werden durch phänomenologische Berücksichtigung der Polaritoneffekte [31] behoben.

Eine Untersuchung des Elektron-Exziton-Streuprozesses, im Rahmen quantenmechanischer Langevin-Gleichungen, wird von Haug und Koch [20] durchgeführt. Die Beschreibung des Überganges erfolgt im Polaritonbild [31], in dem das gekoppelte Exziton und Photon als neues Quasiteilchen (Polariton) aufgefaßt wird. Das Spektrum des Polaritons ist im Bereich des Schnittpunktes der freien Dispersionen von Photon und Exziton stark modifiziert. Es kommt zu zwei Polaritonenzweigen von denen angenommen wird, daß nur der Untere bei optischen Übergängen aktiv ist. Jeder Zweig ist außerdem in einen "exzitonartigen" und einen "photonartigen" Anteil aufgeteilt. Der Emissionsprozeß stellt sich in diesem Modell als Streuung eines Polaritons, vom exzitonartigen Teil zum photonartigen Teil der Dispersion, dar (siehe Abb.3). Entsprechend dieser Vorstellung werden Bewegungsgleichungen der Polaritonen und der Streupartner (Elektronen) aufgestellt. Die Polaritonen werden dann in Photonen (Impulse $p \approx 0$) und Exzitonen (Impulse $p \neq 0$) aufgeteilt. Unter der Annahme, daß Elektronen und Exzitonen im thermischen Gleichgewicht stehen, wird das Spektrum der spontanen- und der stimulierten Emission berechnet.

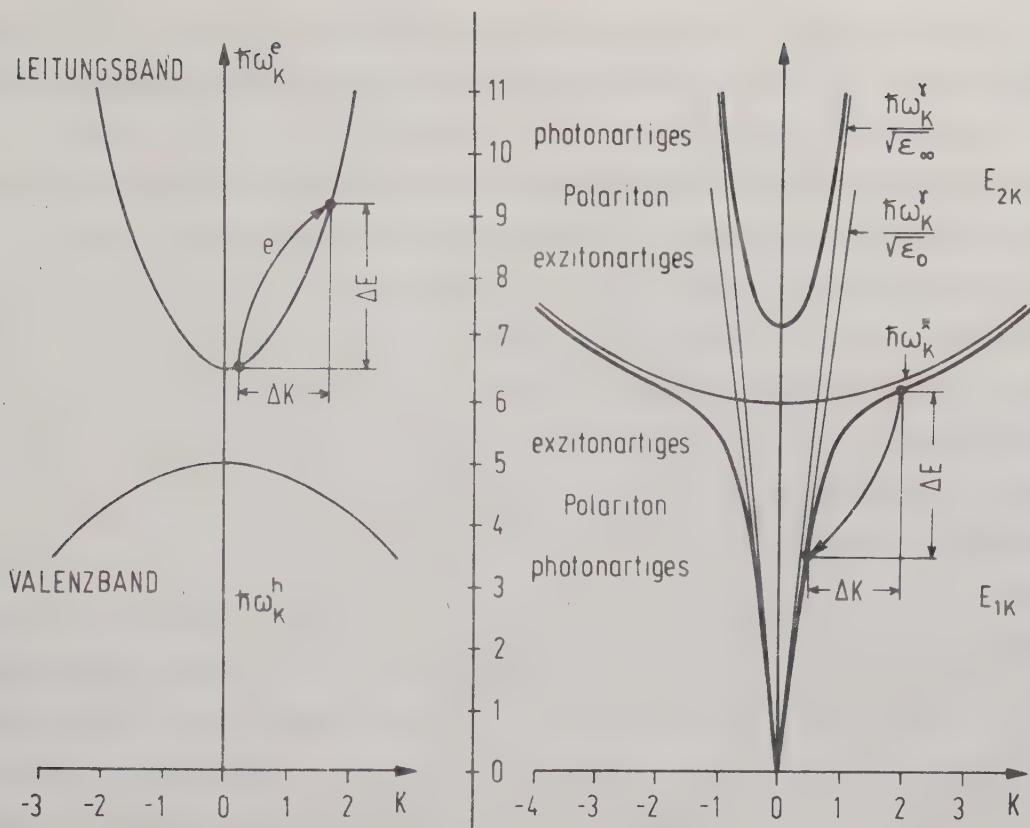


Abbildung 3. Optische Verstärkung im Polaritonbild

1.2 INHALT UND AUFBAU DER ARBEIT

Der Beitrag der Elektron-Exzitonrekombination zu optischen Spektren dominiert im mittleren Temperatur- und Dichtebereich (z.B. CdS $T \geq 77\text{K}$; $n^e \leq 3 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$). Halbleiter der II-VI Verbindungen und die Kupferhalogenide liegen in diesem Fall als exzitonische Systeme vor. Für Kristalle in diesem Bereich wird die komplexe dielektrische Funktion $\epsilon(p, \omega)$ berechnet.

Aus dem Imaginärteil von ϵ läßt sich der Absorptionskoeffizient bestimmen, der die Dämpfung oder Verstärkung elektromagnetischer Wellen im Dielektrikum beschreibt. Der Realteil von ϵ liefert den Brechungsindex, der die Ausbreitungsgeschwindigkeit elektromagnetischer Wellen im Medium festlegt. Zu verstärktem Interesse am Brechungsindex kommt es durch einen neueren Effekt des hochangeregten Halbleiters, der dispersiven optische Bistabilität [32-35]. Dieser kann durch starke Brechungsindexänderung bei zunehmender Anregungsdichte, erklärt werden. In den früheren Arbeiten [17,20] wird der zum Absorptionskoeffizient gehörige Brechungsindex nicht berechnet. Zwar besteht im Prinzip die Möglichkeit diesen durch die Kramers-Kronig-Relation zu erhalten, doch muß dann das Absorptionsspektrum für alle Frequenzen bekannt sein. Die dielektrische Funktion ϵ dagegen, liefert automatisch sowohl Absorptionskoeffizient als auch Brechungsindex für ein bestimmtes Frequenzintervall.

Ein Zusammenhang zwischen dielektrischer Funktion und Photon - Selbstenergie wird in Kapitel 2 hergestellt. Dies bietet die Möglichkeit ϵ , und somit Dispersion und Absorption, mit der Methode der Greenschen Funktion zu berechnen. Für diese Vielteilchenmethode gibt es wohldefinierte Approximationsverfahren, die auf eine Verallgemeinerung der früheren Ergebnisse führen.

In Kapitel 2 wird zunächst die longitudinale und transversale dielektrische Funktion definiert. Diese legen die Greenschen Funktionen der makroskopischen Maxwell'schen Gleichungen fest. Die Berechnung, der dielektrischen Funktion in Linearer-Antwort-Theorie, führt auf die retardierte Dichte-Dichte- und retardierte Stromdichte - Stromdichte - Korrelationsfunktion. Zu einem allgemeineren Ausdruck für die dielektrische Funktion, der nicht mehr auf den Gültigkeitsbereich der Linearen-Antwort-Theorie beschränkt ist, kommt es durch den Vergleich zweier Photon - Greenscher Funktionen, die aus einer makroskopischen und mikroskopischen

Formulierung der Elektrodynamik gewonnen werden. Dieser Vergleich liefert den Zusammenhang von ε und der retardierten Photon - Selbstenergie.

Der Hamiltonoperator des hochangeregten Halbleiters wird in Kapitel 3 hergeleitet und diskutiert. Nach der Definition der systembeschreibenden temperaturabhängigen Greenschen Funktionen, werden einige Eigenschaften der Propagatoren angegeben. Durch die Spektraldichte können die verschiedenen Greenschen Funktionen (retardierte, avancierte und zeitgeordnete Greensche Funktion) einheitlich dargestellt werden. Unter Verwendung der Funktionalableitungsmethode [36-38] werden in Kapitel 4 die gekoppelten Bewegungsgleichungen aufgestellt. Das Gleichungssystem umfaßt die Dyson-Gleichungen der Photonen, Exzitonen und Elektronen, in dem renormierte Propagatoren und eine verallgemeinerte Wechselwirkung auftritt. Man bezeichnet die verallgemeinerte Wechselwirkung auch als Vertex. Die Bewegungsgleichung des Vertex führt auf eine ganze Hierarchie von Gleichungen, die in Abschnitt 4.5 durch Näherungen abgeschlossen werden, die die Gültigkeit der Erhaltungssätze garantieren [39-41].

Die Funktionalableitungsmethode liefert in Kapitel 6 ein nichtstörungstheoretisches Ergebnis für die dielektrische Funktion. Es kann gezeigt werden, daß bei verschwindender Elektron-Exziton-Wechselwirkung ein exakt lösbares Gleichungssystem erscheint, dessen Lösung, das von Hopfield [31] eingeführte Polariton ist. Es werden optische Spektren für verschiedene Dichten und Temperaturen berechnet. Das Temperaturverhalten der Maxima der optischen Verstärkung wird mit experimentellen Ergebnissen von Bohnert und Klingshirn [42,43], sowie von Hvam [23] verglichen. Zusätzlich kommt es zum Vergleich der Linienform eines berechneten und gemessenen [42] Spektrums für $T=130\text{K}$.

Zum Schluß wird die zeitliche Verstärkungsfunktion von Haug und Koch [20] dem hier berechneten Absorptionskoeffizient gegenübergestellt. Es kann

auf tretende Indizes ist zu summieren.

$E_1(k, \omega)$ ist die 1-te Komponente des elektrischen Feldes.

$B_1(k, \omega)$ ist die 1-te Komponente der magnetischen Induktion.

$\epsilon_{jl}(k, \omega)$ ist das Matricelement der j-ten Zeile und l-ten

$\epsilon_{jl}(k, \omega)$ Spalte des dielektrischen Tensors.

$\rho(k, \omega)^{ex}$ ist die externe Ladungsdichte.

$j(k, \omega)^{ex}$ ist die externe Stromdichte.

Lösen der Gleichungen (1.b) und (1.c) führt auf die Bewegungsgleichungen der Potentiale Φ und $\vec{A}$.

$$(2a) \quad \kappa_j \epsilon_{jl}(\vec{k}, \omega) \kappa_l \Phi(\vec{k}, \omega) - \frac{\omega}{c} \kappa_j \epsilon_{jl}(\vec{k}, \omega) A_l(\vec{k}, \omega) = 4\pi S(\vec{k}, \omega)^{ex}$$

$$(2b) \quad \kappa^2 A_l(\vec{k}, \omega) + \frac{\omega}{c} \epsilon_{il}(\vec{k}, \omega) \kappa_l \Phi(\vec{k}, \omega) - \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_{il}(\vec{k}, \omega) A_l(\vec{k}, \omega) = \frac{4\pi}{c} j_l(\vec{k}, \omega)^{ex}$$

Für ein homogenes, isotropes Medium hat der dielektrische Tensor eine besonders einfache Gestalt:

$$(3) \quad \epsilon_{jl}(\vec{k}, \omega) = \frac{\kappa_i \kappa_l}{\kappa^2} \epsilon_{||}(\vec{k}, \omega) + \left[\delta_{jl} - \frac{\kappa_i \kappa_l}{\kappa^2} \right] \epsilon_{\perp}(\vec{k}, \omega)$$

Es ist $\epsilon(k, \omega)$ die longitudinale dielektrische Funktion

und $\epsilon(k, \omega)$ die transversale dielektrische Funktion

$\parallel$ symbolisiert parallel -

$\perp$ bedeutet senkrecht zur Ausbreitungsrichtung k

Analog zum dielektrischen Tensor können auch die Felder in Anteile $\parallel$ und $\perp$ zu k aufgeteilt werden.

$$(4) \quad \vec{A}(\vec{k}, \omega) = \vec{A}^{\parallel}(\vec{k}, \omega) + \vec{A}^{\perp}(\vec{k}, \omega)$$

$$\text{dabei ist } A^{\parallel}(k, \omega) = (k/k) * A(k, \omega)$$

$$\text{und } A^{\perp}(k, \omega) = A(k, \omega) - A^{\parallel}(k, \omega)$$

Die Potentiale Φ und $\vec{A}$ sind nicht eindeutig bestimmt und können einer Eichbedingung unterworfen werden. Wird die Coulomb-Eichung verwendet, d.h. $\text{div } \vec{A}(x, t) = 0$, ist das Vektorpotential $\vec{A}$ rein transversal und der gesamte longitudinale Anteil des elektromagnetischen Feldes steckt im Potential Φ . Unter Verwendung des dielektrischen Tensors (3) entstehen zwei einfache Bewegungsgleichungen für die Potentiale.

$$(5a) \quad \epsilon^{\parallel}(\vec{k}, \omega) k^2 \Phi(\vec{k}, \omega) = 4\pi S(\vec{k}, \omega)^{ex}$$

$$(5b) \quad \left(-k^2 + \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon^{\perp}(\vec{k}, \omega) \right) \vec{A}^{\perp}(\vec{k}, \omega) = -\frac{4\pi}{c} \vec{j}(\vec{k}, \omega)^{ex}$$

Diese inhomogenen Gleichungen definieren die Greenschen Funktionen der makroskopischen Theorie.

$$(6a) \quad D^{\parallel}(\vec{k}, \omega) = \frac{4\pi}{\epsilon^{\parallel}(\vec{k}, \omega) k^2}$$

$$(6b) \quad D(\vec{k}, \omega) = \frac{4\pi c}{\omega^2 \epsilon^\perp(\vec{k}, \omega) - c^2 k^2}$$

2.2 DIELEKTRISCHE FUNKTION UND RETARDIERTER KOMMUTATOR

Um den Zusammenhang von dielektrischer Funktion und mikroskopischen Wechselwirkungen zu zeigen, muß auf die Maxwell Gleichungen (1a) und (1d) zurückgegangen werden. In der dielektrischen Verschiebung $\epsilon_{ij} E_j$ sind die durch das angelegte Feld induzierten Ladungs- und Stromdichten inkorporiert [44]. Für das homogene isotrope Medium ist wieder eine Gleichung rein longitudinal und die andere rein transversal.

$$(7a) \quad \epsilon''(\vec{k}, \omega) E''(\vec{k}, \omega) = E''(\vec{k}, \omega) - \frac{4\pi}{i\kappa} S(\vec{k}, \omega)^{ind}$$

$$(7b) \quad \epsilon^\perp(\vec{k}, \omega) E^\perp(\vec{k}, \omega) = E^\perp(\vec{k}, \omega) - \frac{4\pi}{i\omega} j^\perp(\vec{k}, \omega)^{ind}$$

Die Kontinuitätsgleichung

$$S(\vec{k}, \omega)^{ind} = \frac{\kappa}{\omega} j''(\vec{k}, \omega)^{ind}$$

zeigt, daß die Fouriertransformierte der Ladungsdichte proportional zur longitudinalen Stromdichte ist. Wird dieser Zusammenhang in (7a) einge-

setzt, erhält man eine Gleichung für das longitudinale Feld, die zu (7b) äquivalent ist.

$$(8) \quad \mathcal{E}''(\vec{k}, \omega) E''(\vec{k}, \omega) = E''(\vec{k}, \omega) - \frac{4\pi}{i\omega} j''(\vec{k}, \omega)^{ind}$$

Für den $\lim(k \rightarrow 0)$ kann zwischen einer longitudinalen und transversalen Stromdichte nicht mehr unterschieden werden. In diesem Grenzfall sind beide dielektrische Funktionen gleich.

$$(9) \quad \lim_{k \rightarrow 0} \mathcal{E}''(\vec{k}, \omega) = \lim_{k \rightarrow 0} \mathcal{E}^{\perp}(\vec{k}, \omega) = \mathcal{E}(\omega)$$

Die dielektrische Funktion ist bekannt, wenn die Bewegungsgleichungen der induzierten Stromdichten gelöst sind. Dies kann z.B. in Linearer-Antwort-Theorie geschehen. Für die transversale Stromdichte ist der Wechselwirkungsoperator

$$(10) \quad H_1(t) = -\frac{1}{c} \int d^3x \vec{j}(\vec{x}, t) \vec{A}(\vec{x}, t)$$

woraus die folgende transversale Stromdichte resultiert:

$$(11) \quad j^{\perp}(\vec{k}, \omega)^{ind} = \frac{i}{\hbar c} \int_{-\infty}^{+\infty} d^3x dt \Theta(t-t') \langle [j^{\perp}(\vec{x}, t), j^{\perp}(\vec{x}', t')] \rangle_0 e^{-i(\vec{k}\vec{x} - \omega t)} H^{\perp}(\vec{k}, \omega)$$

$$(12) \quad \langle \dots \rangle_0 = \text{Spur} (e^{-\beta H_0} \dots) / \text{Spur} (e^{-\beta H_0})$$

(12) ist die Ensemblemittelung mit dem Operator H_0 des freien Lichtfeldes. Das Vektorpotential ist verknüpft mit dem transversalen Elektrischen Feld,

$$(13) \quad A^\perp(\vec{k}, \omega) = \frac{c}{i\omega} E^\perp(\vec{k}, \omega)$$

so daß die transversale dielektrische Funktion

$$(14) \quad \epsilon^\perp(\vec{k}, \omega) = 1 - \frac{4\pi}{\omega^2} \frac{(-i)}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} d^3x dt \Theta(t-t') \langle [j^\perp(x, t), j^\perp(x', t')] \rangle_0 e^{-i(\vec{k}\vec{x} - \omega t)}$$

durch eine retardierte Stromdichte-Stromdichte-Korrelationsfunktion bestimmt ist. Analog ist die longitudinale dielektrische Funktion durch eine retardierte Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion gegeben.

2.3 DIELEKTRISCHE FUNKTION UND PHOTON-SELBSTENERGIE

Durch eine andere Methode [45,46] wird eine allgemeinere Beziehung zwischen dielektrischer Funktion und Photon-Selbstenergie hergestellt, die nicht mehr auf den Gültigkeitsbereich der Linearen-Antwort-Theorie eingeschränkt ist. Dazu wird die Bewegungsgleichung einer transversalen Photon-Greenschen Funktion betrachtet, die als Korrelationsfunktion des Vektorpotentials definiert ist.

$$(15) \quad D(x-x', t-t')^R = -i\Theta(t-t') \langle [A(x, t), A(x', t')] \rangle$$

Im Impuls- und Frequenzraum ist die formale Lösung dieser retardierten Photon-Greenschen Funktion:

$$(16) \quad D^\perp(\vec{p}, \omega)^R = \frac{2\omega_p^2}{\omega^2 - (\omega_p^s)^2 - 2\omega_p^s \Pi^\perp(\vec{p}, \omega)^R}$$

Die Pole einer Greenschen Funktion stellen das renormierte Eigenwertspektrum dar. Bei der Greenschen Funktion der mikroskopischen Theorie ist die Wechselwirkung des Photons mit der Materie, durch die Photon - Selbstenergie gegeben. Bei der Greenschen Funktion(6b) der makroskopischen Formulierung steckt der Einfluß der Materie auf die Eigenmoden in der transversalen dielektrischen Funktion. Der Vergleich dieser makroskopischen und mikroskopischen Eigenmoden, verknüpft die dielektrische Funktion mit der Photon-Selbstenergie.

$$(17) \quad \epsilon^\perp(\vec{p}, \omega) = 1 - \frac{2\omega_p^s}{\omega^2} \Pi^\perp(\vec{p}, \omega)^R$$

Üblicherweise wird die Photon-Selbstenergie auch Polarisationsfunktion genannt, was durch Gleichung (17) zum Ausdruck kommt. Da im Folgenden ausschließlich die transversale dielektrische Funktion betrachtet wird, und diese im langwelligen Grenzfall mit der longitudinalen übereinstimmt, wird das Symbol $^\perp$ nicht mehr angebracht.

3. MODELL DES HOCHANGEREGETEN EXZITONISCHEN HALBLEITERS

3.1 DER HAMILTONOPERATOR

Zur Berechnung von Dispersion und Absorption ist der Hamiltonoperator eines Lichtfeldes gesucht, das in Wechselwirkung mit einem dielektrischen Medium steht. Diesen Hamiltonoperator erhält man durch quantisieren der Hamiltonfunktion eines Elektrons, das mit elektromagnetischer Strahlung, wechselwirkt und fügt das freie quantisierte Lichtfeld hinzu. Unter Berücksichtigung der Coulomb-Eichung lautet die klassische Hamiltondichte dieses Problems:

$$(18) \quad \mathcal{H} = 2\pi c^2 \vec{\Pi}(\vec{x})^2 + \frac{1}{8\pi} \sum_{i=1}^3 (\text{grad } A_i(\vec{x}))^2 + \frac{1}{2m} (\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{x}))^2 + V_G(\vec{x})$$

$\vec{A}(\vec{x})$ ist das Vektorpotential des Lichtfeldes.

$\vec{\Pi}(\vec{x}) = \dot{\vec{A}}(\vec{x}) / (4\pi c^2)$ ist der zu $\vec{A}(\vec{x})$ kanonisch konjugierte Feldimpuls.

$\vec{p}$ ist der Impuls des Teilchens im elektromagnetischen Feld.

$V_G(\vec{x})$ ist das gitterperiodische Potential des Kristalles.

Die Quantisierung erfolgt durch Ersetzen der Feldfunktionen des elektromagnetischen Feldes durch Feldoperatoren, die den Vertauschungsregeln

$$\begin{aligned} [\pi_i^{\vec{A}}(\vec{x}), A_j(\vec{x}')] &= \frac{\hbar}{i} (\delta_{ij} \delta(\vec{x}-\vec{x}') - \frac{1}{4\pi} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \frac{1}{|\vec{x}-\vec{x}'|}) \\ [A_i(\vec{x}), A_j(\vec{x}')] &= 0 \\ [\pi_i^{\vec{A}}(\vec{x}), \pi_j^{\vec{A}}(\vec{x}')] &= 0 \end{aligned}$$

genügen und durch Einführen von Feldoperatoren des Materiefeldes, deren Vertauschungsregeln durch den Antikommutator festgelegt sind.

$$\begin{aligned} \{ \Psi(\vec{x}), \Psi^\dagger(\vec{x}') \} &= \delta(\vec{x}-\vec{x}') \\ \{ \Psi(\vec{x}), \Psi(\vec{x}') \} &= 0 \\ \{ \Psi^\dagger(\vec{x}), \Psi^\dagger(\vec{x}') \} &= 0 \end{aligned}$$

Der Hamiltonoperator kann als Summe von 5 Beiträgen geschrieben werden.

$$(19) \quad H = H^{\mathcal{R}} + H^{\vec{A} \cdot \vec{j}} + H^{\mathcal{R}^2} + H_0^{\mathcal{T}} + H_{\mathcal{W}\mathcal{W}}^{\mathcal{T}}$$

$$(19a) \quad H^{\mathcal{R}} = \int d^3x \left[2\pi c^2 \pi^{\vec{A}}(\vec{x})^2 + \frac{1}{8\pi} \sum_{i=1}^3 (\text{grad } A_i(\vec{x}))^2 \right]$$

Ist der Hamiltonoperator des freien Lichtfeldes.

$$(19b) \quad H^{\vec{A} \cdot \vec{j}} = \int d^3x \, \psi^\dagger(\vec{x}) \left[-\frac{e}{mc} \vec{A}(\vec{x}) \vec{p} \right] \psi(\vec{x})$$

Ist die Wechselwirkung des Lichtfeldes mit der Materie. $\vec{j} = (e/m) \psi^\dagger \vec{p} \psi$ ist der Stromdichteoperator. Deshalb wird dieser Beitrag auch $\vec{A} \cdot \vec{j}$ -Kopplung genannt.

$$(19c) \quad H^{\vec{A}^2} = \int d^3x \, \psi^\dagger(\vec{x}) \left[\frac{1}{2m} \frac{e^2}{c^2} \vec{A}(\vec{x})^2 \right] \psi(\vec{x})$$

Ist die Photon-Photon-Wechselwirkung.

$$(19d) \quad H_0^T = \int d^3x \, \psi^\dagger(\vec{x}) \left[-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V_g(\vec{x}) \right] \psi(\vec{x})$$

Ist der Hamiltonoperator der Materie, die sich in einem gitterperiodischen Potential bewegt.

$$(19e) \quad H_{WW}^T = \int d^3x d^3x' \, \psi^\dagger(\vec{x}) \psi^\dagger(\vec{x}') \frac{e^2}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \psi(\vec{x}) \psi(\vec{x}')$$

Ist die Coulombsche Wechselwirkung der Materie, die dem Hamiltonoperator der aus (18) entsteht, additiv hinzugefügt wird.

Die Hamiltonoperatoren (19a-e) werden durch Entwicklung der Feldoperatoren nach vollständigen Funktionensätzen umgeformt. Das Vektorpotential $\vec{A}$ wird nach ebenen Wellen, den Eigenfunktionen des elektromagnetischen Feldes, entwickelt.

$$(20) \quad \vec{H}(\vec{x}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{\hbar 2\pi c^2}{\omega_{\mathbf{k}}}} (e^{i\vec{k}\vec{x}} a_{\mathbf{k}} + e^{-i\vec{k}\vec{x}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger}) \vec{e}_{\mathbf{k}}$$

Aus A kann das kanonisch konjugierte Feld Π^A berechnet werden.

$$(21) \quad \vec{\Pi}(\vec{x}) = \frac{i}{V} \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{\hbar \omega_{\mathbf{k}}}{8\pi c^2}} (-e^{i\vec{k}\vec{x}} a_{\mathbf{k}} + e^{-i\vec{k}\vec{x}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger}) \vec{e}_{\mathbf{k}}$$

Es ist $\hbar \omega_{\mathbf{k}} = ck$ die Photonenergie

und $\vec{e}_{\mathbf{k}}$ die Polarisierung des elektromagnetischen Feldes.

Einsetzen dieser Entwicklung in H^{γ} ergibt

$$(22) \quad H^{\gamma} = \sum_{\mathbf{k}} \hbar \omega_{\mathbf{k}} \left[a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \right]$$

$a_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ ist der Erzeugungsoperator der elektromagnetischen Quanten, der den folgenden Vertauschungsregeln gehorcht:

$$(23a) \quad [a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}'}^{\dagger}] = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}$$

$$(23b) \quad [a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}'}] = 0$$

$$(23c) \quad [a_{\mathbf{k}}^{\dagger}, a_{\mathbf{k}'}^{\dagger}] = 0$$

Zur Bestimmung der Basis für die Feldoperatoren Ψ wird die Eigenwertgleichung

$$(24) \quad \left[-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V_g(\vec{x}) \right] \varphi_{k\mu}(\vec{x}) = E_{k\mu}^0 \varphi_{k\mu}(\vec{x})$$

gelöst. Das gitterperiodische Potential führt zum Auftreten von Bändern, die mit der Quantenzahl μ bezeichnet werden. Die Eigenfunktionen $\varphi_{k\mu}$ sind Blochfunktionen, die üblicherweise auf die Anzahl der Gitterzellen des Kristalls normiert sind.

$$(25) \quad \varphi_{k\mu}(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\vec{k}\vec{x}} u_{k\mu}(\vec{x})$$

N ist die Anzahl der Gitterzellen des Kristalls.

$u_{k\mu}(\vec{x})$ ist eine gitterperiodische Funktion.

Die Blochfunktionen erfüllen die Orthogonalitätsrelation:

$$(26) \quad \int d^3x \varphi_{k\mu}^*(\vec{x}) \varphi_{k'\mu'}(\vec{x}) = \delta_{k,k'} \delta_{\mu,\mu'}$$

Zur Berechnung der folgenden Matrixelemente ist es oft nützlich, vom Integral über das Kristallvolumen zum Integral über das Volumen einer Gitterzelle überzugehen.

$$(27) \quad \int_{\Omega} d^3x \varphi_{k\mu}^*(\vec{x}) \varphi_{k'\mu'}(\vec{x}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{L}}^{\text{Gitterzellen}} \int_{\Omega_g} d^3x e^{-i\vec{k}\vec{x}} u_{k\mu}^*(\vec{x}) e^{i\vec{k}'\vec{x}} u_{k'\mu'}(\vec{x})$$

Für kleine k, k' sind die Exponentialfunktionen langwellig und werden aus dem Integral über die Gitterzelle herausgezogen. Liegen die Bandextrema bei $k=0$, können die gitterperiodischen Funktionen $u_{k\mu}(x)$ um diesen Punkt entwickelt werden und man erhält:

$$(28) \quad \frac{1}{N} \sum_L \overset{\text{Gitterzellen}}{e^{-i\vec{k}\vec{L}}} e^{i\vec{k}'\vec{L}} \int_{\Omega_g} d^3x u_{0\mu}^*(\vec{x}) u_{0\mu'}(\vec{x}) \cong \delta_{k,k'} \delta_{\mu,\mu'}$$

In dieser Arbeit beschränke ich mich auf ein Zweibandmodell bei dem nur Valenz- und Leitungsband des Halbleiters berücksichtigt wird. Die Entwicklung der Feldoperatoren Ψ ist:

$$(29) \quad \Psi(\vec{x}) = \sum_{k,\mu=V,L} c_{k\mu} \varphi_{k\mu}(\vec{x})$$

V bedeutet Valenzband

L bedeutet Leitungsband

$c_{k\mu}$ ist der Vernichtungsoperator der elektronischen Anregungen im Band μ . Die zugehörigen Vertauschungsregeln sind:

$$(30a) \quad \{ c_{k\mu}, c_{k'\mu'}^+ \} = \delta_{k,k'} \delta_{\mu,\mu'}$$

$$(30b) \quad \{ c_{k\mu}, c_{k'\mu'} \} = 0$$

$$(30c) \quad \{ c_{k\mu}^+, c_{k'\mu'}^+ \} = 0$$

Der Vorgang, ein Elektron im Valenzband zu erzeugen (vernichten), kann auch so aufgefaßt werden, als ob ein Loch dort vernichtet (erzeugt) wird.

Durch diese Betrachtungsweise kann das gefüllte Valenzband aus der Rechnung eliminiert werden. Der Übergang zum Elektron-Loch-Bild geschieht durch die Transformation:

$$(31a) \quad c_{\kappa L}^+ \longrightarrow c_{\kappa}^+ \quad c_{\kappa V}^+ \longrightarrow d_{-\kappa}$$

$$(31b) \quad c_{\kappa L} \longrightarrow c_{\kappa} \quad c_{\kappa V} \longrightarrow d_{-\kappa}^+$$

c_{κ} ist der Erzeuger eines Elektrons im Leitungsband.

d_{κ} ist der Erzeuger eines Loches im Valenzband.

Auf diese Weise kann der Feldoperator Ψ in einen Elektron- und Lochanteil aufgeteilt werden.

$$(32a) \quad \Psi(\vec{x}) = \psi(\vec{x}) + \phi(\vec{x}) = \sum_{\kappa} c_{\kappa} \varphi_{\kappa L}(\vec{x}) + \sum_{\kappa} d_{\kappa}^+ \varphi_{-\kappa V}(\vec{x})$$

$$(32b) \quad \Psi^+(\vec{x}) = \psi^+(\vec{x}) + \phi^+(\vec{x}) = \sum_{\kappa} c_{\kappa}^+ \varphi_{\kappa L}^*(\vec{x}) + \sum_{\kappa} d_{\kappa} \varphi_{-\kappa V}^*(\vec{x})$$

$\psi(x)$ beschreibt das Elektron im Leitungsband.

$\phi(x)$ beschreibt das Loch im Valenzband.

Nach Einführen der Entwicklung der Feldoperatoren Ψ kann die Umformung der übrigen Hamiltonoperatoren vorgenommen werden. Zuerst wird die Wechselwirkung von Licht und Materie (19b) betrachtet. Da das Licht nur Interband-Übergänge initiiert, sind zwei Beiträge zu berechnen.

$$(33) \quad H^{\vec{A}, \vec{J}} = \int d^3x \, \psi^\dagger(\vec{x}) \left[-\frac{e}{mc} \vec{A}(\vec{x}) \vec{p} \right] \psi(\vec{x}) + hc$$

hc bedeutet der hermitesch konjugierte Beitrag.

Einsetzen der Entwicklung für $A(x)$, $\psi(x)$ und $\phi(x)$ (20, 32a+b) ergibt:

$$(34) \quad H^{\vec{A}, \vec{J}} = -\frac{e}{mc} \sum_{\vec{k}L} \sqrt{\frac{\hbar 2\pi c^2}{V \omega_{\vec{k}}}} (a_{\vec{k}} + a_{-\vec{k}}^\dagger) c_L^\dagger d_{\vec{k}-L}^\dagger M_{L\vec{V}} + hc$$

wobei

$$(35) \quad M_{L\vec{V}} = \int d^3x \, u_{ol}^*(\vec{x}) (\vec{e}_L \cdot \vec{p}) u_{ov}(\vec{x})$$

ist.

Unter der Annahme, daß nur schwach gebundene Exzitonen existieren und daß die Elektronmasse sehr viel kleiner ist als die Lochmasse ($m_e \ll m_h$), kann der Paaroperator nach den Eigenfunktionen der Relativ- und Schwerpunktsbewegung des Wannierexzitons entwickelt werden. Die Näherung bezüglich der Teilchenmasse bedeutet, daß der Schwerpunkt des Exzitons mit dem Loch zusammenfällt, während das Elektron die Relativbewegung ausführt.

$$(36) \quad \psi^\dagger(\vec{x}_e) \phi^\dagger(\vec{x}_h) = \sum_{\vec{k}n} \varphi_n^*(r) \frac{e^{-i\vec{k}\vec{R}}}{\sqrt{V}} b_{\vec{k}n}^\dagger$$

r ist die Relativkoordinate

R ist die Schwerpunktkoordinate

$b_{\vec{k}n}$ ist der Erzeugungsoperator eines Exzitons mit Schwerpunktimпульs $\vec{k}$ und Hauptquantenzahl n .

Die Vertauschungsregeln der Exzitonoperatoren lauten:

$$(37a) \quad [b_{kn}, b_{k'n'}^\dagger] = \delta_{k,k'} \delta_{n,n'} + \mathcal{O}(n^3 a_0^3)$$

$$(37b) \quad [b_{kn}, b_{k'n'}] = 0$$

$$(37c) \quad [b_{kn}^\dagger, b_{k'n'}^\dagger] = 0$$

a_0 ist der Bohrsche Radius des Exzitons.

Wir sehen, daß Exzitonen, bis auf einen Beitrag proportional der Exziton-
dichte, Bosoncharakter haben. Dies macht deutlich, daß die Exzitonformu-
lierung nur unterhalb einer Grenzdichte ($n_x a_0^3 \ll 1$) sinnvoll ist. Diese
Bedingung stellt eine erste Abschätzung der Motttdichte dar. Sie ergibt für
CdS $n_x \ll 5 \cdot 10^{19}$.

Wird zusätzlich die Annahme gemacht, daß die Exzitonen nur im 1s Zustand
vorliegen, erhält man den folgenden Zusammenhang der Exziton- und Elek-
tron-Lochoperatoren.

$$(38) \quad c_L^\dagger d_{k-L}^\dagger = \varphi_{1s}^*(L) b_k^\dagger$$

Einsetzen des Exzitonoperators in den Hamiltonoperator (34) und addieren
des hermitesch konjugierten Beitrages ergibt:

$$(39) \quad H^{\vec{R}, \vec{j}} = \sum_k i \frac{e}{m} \sqrt{\frac{\hbar 2\pi}{\omega_k}} \varphi_{1s}(\vec{r}=0) |M_{Lv}| (a_{-k} + a_k^\dagger) (b_k - b_{-k}^\dagger)$$

Aus der Wechselwirkung des quantisierten Photon- und Polarisationsfeldes hat Hopfield [31] einen Hamiltonoperator berechnet, der zum Hamiltonoperator der Exziton-Photon-Kopplung äquivalent ist. Das zugehörige Matrixelement ist,

$$(40) \quad B_k = i\hbar \sqrt{\frac{\omega_0^2 \omega_k^x}{4\omega_k^s}}$$

ω_0 ist die Plasmafrequenz des nichtangeregten Kristalles.

ω_k^x ist die freie Exzitonfrequenz.

Anstelle des ursprünglichen - wird in (39) das Matrixelement (40) eingesetzt.

Auf die gleiche Art und Weise ist der Operator der Photon - Photon - Wechselwirkung umzuformen.

$$(41) \quad H^{H^2} = \sum_k \frac{1}{2} A_k (a_{-k} + a_k^+)(a_k + a_{-k}^+)$$

mit dem Matrixelement:

$$(42) \quad A_k = \frac{\hbar \omega_0^2}{2 \omega_k^s}$$

Die verbleibenden zwei Beiträge (19d+e) stellen die Energie beider Bänder und die Coulombsche Wechselwirkung der elementaren Anregungen des Kristalles dar. Die Entwicklung der Feldoperatoren in beide Bandanteile ergibt eine Reihe von Termen. Beiträge, welche die Teilchenzahlerhaltung in

den einzelnen Bändern verletzen, werden nicht explizit mitgenommen, sondern durch eine statisch abgeschirmte Coulombsche Wechselwirkung berücksichtigt. Die Operatoren der Löcher müssen außerdem in Normalordnung gebracht werden. Dies führt auf eine Reihe weiterer Beiträge. Man erhält ein konstantes Glied, das der Energie des gefüllten Valenzbandes entspricht. Durch geeignete Wahl des Energie-Nullpunktes verschwindet dieser Beitrag. Weiter kommt es zu einer Korrektur der Einteilchenenergien. Für den Fall, daß sich Elektronen und Löcher in der Nähe der Bandkanten aufhalten (was meist realisiert ist), können die Einteilchenenergien um die Extrema der Bänder entwickelt werden. Die effektive Massennäherung in Verbindung mit der Wahl des Energie-Nullpunktes an der Oberkante des Valenzbandes, liefert folgende Approximation für die Energie der Bänder :

$$(43) \quad E_L(k) = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$$

$$(44) \quad E_V(k) = - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h}$$

E_g ist die Lückenenergie

m_e ist die effektive Masse des Elektrons

m_h ist die effektive Masse des Loches

Bei Verwendung der obigen Näherungen bekommt der Hamiltonoperator der wechselwirkenden Elektronen und Löcher (19d+e) die folgende Gestalt:

$$\begin{aligned}
(45) \quad H_o^T + H_{ww}^T = & \int d^3x \psi^\dagger(\vec{x}) \left[-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m_e} + E_g \right] \psi(\vec{x}) \\
& + \int d^3x \phi^\dagger(\vec{x}) \left[-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m_h} \right] \phi(\vec{x}) \\
& + \frac{1}{2} \int d^3x d^3y \psi^\dagger(\vec{x}) \psi^\dagger(\vec{y}) V(\vec{x}-\vec{y}) \psi(\vec{y}) \psi(\vec{x}) \\
& + \frac{1}{2} \int d^3x d^3y \phi^\dagger(\vec{x}) \phi^\dagger(\vec{y}) V(\vec{x}-\vec{y}) \phi(\vec{y}) \phi(\vec{x}) \\
& - \int d^3x d^3y \psi^\dagger(\vec{x}) \phi^\dagger(\vec{y}) V(\vec{x}-\vec{y}) \phi(\vec{y}) \psi(\vec{x})
\end{aligned}$$

$V(\vec{x}) = e^2 / (\epsilon_0 |\vec{x}|)$ ist die abgeschirmte Coulombsche Wechselwirkung.

Die wechselwirkenden Elektronen und Löcher stellen durch ihre endliche Lebensdauer ein offenes System dar. Durch stetiges Pumpen kann jedoch eine mittlere Zahl von Anregungen in den einzelnen Bändern erreicht werden. Dies ermöglicht die Beschreibung des Systems im Quasigleichgewicht, bei dem die mittlere Anregungsdichte durch ein quasichemisches Potential μ_e , μ_h in den Besetzungsfunktionen, festgelegt ist. Die Quasigleichgewichtsannahme ist in Situationen gerechtfertigt, bei denen die Lebensdauer der elementaren Anregungen größer ist als die Relaxationszeit der Bänder ins thermische Gleichgewicht. In dieser Arbeit wird angenommen, daß die Quasigleichgewichtshypothese gültig ist.

Der Hamiltonoperator (45) ist Ausgangspunkt zur Berechnung von Energiebeiträgen sowohl freier - als auch gebundener Elektronen und Löcher. Werden die Feldoperatoren z.B. nach Blochzuständen entwickelt, treten die Energien freier Elektronen und Löcher in Erscheinung.

$$\begin{aligned}
 (46) \quad H_o^T + H_{ww}^T &= \sum_k \hbar [\omega_k^e c_k^\dagger c_k + \omega_k^h d_k^\dagger d_k] \\
 &+ \frac{1}{2} \sum_{kq q' k'} V_{k-k'} \delta_{k-k', q'-q} c_k^\dagger c_q^\dagger c_q c_{k'} \\
 &+ \frac{1}{2} \sum_{kq q' k'} V_{k-k'} \delta_{k-k', q'-q} d_k^\dagger d_q^\dagger d_q d_{k'} \\
 &- \sum_{kq q' k'} V_{k-k'} \delta_{k-k', q'-q} c_k^\dagger d_q^\dagger d_q c_{k'}
 \end{aligned}$$

$\hbar\omega_k^e = \hbar^2 k^2 / (2m_e) + E_G$ ist die freie Energie der Elektronen.

$\hbar\omega_k^h = \hbar^2 k^2 / (2m_h)$ ist die freie Energie der Löcher.

$V_q = 4\pi e^2 / (\epsilon_0 q^2)$ ist die Fouriertransformierte der Coulombschen Wechselwirkung.

Liegen die Elektronen und Löcher weitgehend gebunden vor, können in Hamiltonoperator (45) die Elektron-Loch-Operatoren auf Exzitonoperatoren transformiert werden. Es resultiert ein Hamiltonoperator wechselwirkender Exzitonen. Die beiden ersten Summanden und die anziehende Coulombsche Wechselwirkung

$$\int d\vec{x}_e d\vec{x}_h \psi(\vec{x}_e) \phi(\vec{x}_h) \left[-\frac{\hbar^2 \Delta_e}{2m_e} + E_s - \frac{\hbar^2 \Delta_h}{2m_h} - \frac{e^2}{\epsilon_0 |\vec{x}_e - \vec{x}_h|} \right] \phi(\vec{x}_h) \psi(\vec{x}_e)$$

ergeben nach Entwicklung der Paaroperatoren in Relativ- und Schwerpunkts-eigenfunktionen des Exzitons (36), den Hamiltonoperator der freien Exzitonen. Aus den Wechselwirkungsoperatoren kann zusätzlich eine Exziton-Exziton-Wechselwirkung berechnet werden, so daß der Hamiltonoperator (45) ganz im Exzitonbild erscheint.

$$(47) \quad H_0^T + H_{WW}^T = \sum_{\mathbf{k}} \hbar \omega_{\mathbf{k}}^x b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \mathbf{q}', \mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^{x-x} \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{q}'+\mathbf{k}'} b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}'} b_{\mathbf{k}'}$$

$\hbar \omega_{\mathbf{k}}^x = \hbar^2 k^2 / (2M_x) + E_G - E_b^x$ ist die freie Energie des Exzitons.

$$(47a) \quad W_{\mathbf{q}}^{x-x} = \frac{1}{2} \int d^3R W(R) e^{-i\mathbf{q}\cdot\vec{R}}$$

ist die Fouriertransformierte der Exziton-Exziton-Wechselwirkung

$$(47b) \quad W(\vec{R}) = \int d\vec{r} d\vec{r}' (V(\vec{R}) + V(\vec{R} + \vec{r} - \vec{r}') - V(\vec{R} + \vec{r}) - V(\vec{R} - \vec{r}')) \cdot (|\varphi_{1s}(\vec{r})|^2 |\varphi_{1s}(\vec{r}')|^2 - \varphi_{1s}(\vec{r} + \vec{R}) \varphi_{1s}^*(\vec{r}) \varphi_{1s}(\vec{r} - \vec{R}) \varphi_{1s}^*(\vec{r}'))$$

M_x ist die Masse des Exzitons

E_b ist die Exziton-Bindungsenergie

Im mittleren Bereich der Anregungsdichte liegen die Ladungsträger nicht vollständig in den eben beschriebenen Grenzfällen vor, sondern es gibt sowohl freie Elektronen und Löcher als auch Exzitonen. In diesem Fall muß für den jeweiligen Anteil der adäquate Hamiltonoperator zugrunde gelegt werden. Mit der Annahme, daß die Elektron-Loch-Paare entweder im ls-Zustand oder ionisiert vorliegen, erhält man ein System von drei wechselwirkenden Teilchenfeldern (e,h,x), die durch die chemische Reaktionsgleichung $x \rightleftharpoons e+h$ in Beziehung stehen. Die Teilchendichten in den einzelnen Bändern werden durch quasichemische Potentiale μ_e, μ_h, μ_x festgelegt. Stehen die Teilchenfelder im Quasigleichgewicht, sind die quasichemischen Potentiale über das Massenwirkungsgesetz verknüpft. Mit der Projektionstechnik [47] können die Matrixelemente der Wechselwirkung zwischen freien und gebundenen Ladungsträgern berechnet werden. Aus dem dritten und fünften Summanden von Hamiltonoperator (45) kann z.B. die Elektron-Exziton-Wechselwirkung berechnet werden. Sie ist:

$$(48) \quad \sum_{kq,q'} W_{k,k'}^{e-x} \delta_{k+q,q'+k'} c_k^\dagger b_q^\dagger b_{q'} c_{k'}$$

mit

$$(48a) \quad W_{k,k'}^{e-x} = \left[-V_{k-k'} + \sum_m V_{k+m} \varphi_{k'}^* \varphi_m + \sum_m V_{k-k'} \varphi_m \varphi_{m+k'-k}^* - \sum_m V_{-m} \varphi_{m+k'}^* \varphi_{k+m} \right]$$

Im Grenzfall verschwindender Impulse ist das Matrixelement in [47] berechnet.

$$(49) \quad W_{0,0}^{e-x} = U = 24\pi \frac{a_0^3}{V} E_b^x$$

Nach der Berechnung der Exziton-Loch-Wechselwirkung W^{h-x} kann der Hamiltonoperator der wechselwirkenden Elektronen, Löcher und Exzitonen hingeschrieben werden.

$$\begin{aligned}
 (50) \quad H_0^T + H_{WW}^T = & \sum_{\mathbf{k}} \hbar [\omega_{\mathbf{k}}^x b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}} + \omega_{\mathbf{k}}^e c_{\mathbf{k}}^+ c_{\mathbf{k}} + \omega_{\mathbf{k}}^h d_{\mathbf{k}}^+ d_{\mathbf{k}}] \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \mathbf{q} \mathbf{q}' \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{q}'+\mathbf{k}'} [c_{\mathbf{k}}^+ c_{\mathbf{q}}^+ c_{\mathbf{q}'} c_{\mathbf{k}'} + d_{\mathbf{k}}^+ d_{\mathbf{q}}^+ d_{\mathbf{q}'} d_{\mathbf{k}'} - 2 c_{\mathbf{k}}^+ d_{\mathbf{q}}^+ d_{\mathbf{q}'} c_{\mathbf{k}'}] \\
 & + \sum_{\mathbf{k} \mathbf{q} \mathbf{q}' \mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^{e-x} \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{q}'+\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}'} c_{\mathbf{k}'} \\
 & + \sum_{\mathbf{k} \mathbf{q} \mathbf{q}' \mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^{h-x} \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{q}'+\mathbf{k}'} d_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}'} d_{\mathbf{k}'} \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \mathbf{q} \mathbf{q}' \mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^{x-x} \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{q}'+\mathbf{k}'} b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}'} b_{\mathbf{k}'}
 \end{aligned}$$

Um diesen komplexen Hamiltonoperator zu vereinfachen werden einige physikalische Argumente angeführt.

a) Die Löcher haben in vielen Halbleitern eine viel größere effektive Masse als die Elektronen. Dadurch ist die Lochmasse praktisch gleich der Exzitonmasse (z.B. CdS : $m_h/m_0=1.35$, $M_x/m_0=1.61$). Bei gegebenem Impulsübertrag verletzt die durch Löcher assistierte Exzitonrekombination nur unwesentlich die Energieerhaltung. Der Bereich optischer Verstärkung liegt deshalb bei diesem Prozeß im Gebiet starker Exzitonabsorption. Im Hinblick auf optische Verstärkung sind Löcher nicht relevant und werden ganz aus der Beschreibung eliminiert.

b) Der Beitrag der Elektron-Elektron-Wechselwirkung wird mit zunehmender Anregungsdichte immer wichtiger. Er führt zu einer Renormierung der Einteilchenenergien der Elektronen im Leitungsband. Im Bereich der Mott-dichte ($\text{CdS } n^e \approx 3 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$) wird diese Renormierung so stark, daß die Exzitonlinie vom Leitungsband eingeholt wird. Das exzitonische System ist ins Elektron-Loch-Plasma übergegangen. Dieser Vorgang kann mit Hamiltonoperator (46), der über den ganzen Dichtebereich gültig ist, beschrieben werden.

Mit Hamiltonoperator (50) wollen wir physikalische Aussagen über den Bereich unterhalb der Mott-dichte machen. Dieser Hamiltonoperator verliert beim Mottübergang seine Gültigkeit, da dort die Exzitonformulierung zusammenbricht. Insbesondere kann mit Hamiltonoperator (50) nicht der Übergang vom exzitonischen System zum Elektron-Loch-Plasma beschrieben werden, bei dem die Elektron-Elektron-Wechselwirkung von besonderer Wichtigkeit ist. Da unterhalb der Mott-dichte von der Elektron-Elektron und der Exziton-Exziton-Wechselwirkung nur kleine Renormierungen der Einteilchenenergien der Bänder zu erwarten sind, werden sie, um die Berechnung zu vereinfachen, vernachlässigt.

Berücksichtigung der angegebenen Vereinfachungen führt auf folgenden Hamiltonoperator, der zur Untersuchung optischer Eigenschaften exzitonischer Systeme, herangezogen wird.

$$\begin{aligned}
 (51) \quad H &= \sum_k [\omega_k^{\gamma} a_k^{\dagger} a_k + \omega_k^x b_k^{\dagger} b_k + \omega_k^e c_k^{\dagger} c_k] \\
 &+ \sum_k [B_k \varphi_k^{\gamma} \chi_k^x + \frac{1}{2} A_k \varphi_k^{\gamma} \varphi_k^{\gamma}] \\
 &+ \frac{1}{2} \sum_{k_1 \dots k_4} U \delta_{k_1 - k_2, k_3 - k_4} c_{k_1}^{\dagger} c_{k_2} \varphi_{k_3}^x \varphi_{-k_4}^x
 \end{aligned}$$

Es sind ω_k^{γ} , ω_k^x und ω_k^e die freien Frequenzen der Photonen (γ)
Exzitonen (x) und Elektronen (e).

A_k ist das Matrixelement der Photon-Photon-Wechselwirkung (42).

B_k ist das Matrixelement der Exziton-Photon-Wechselwirkung (40).

U ist das Matrixelement der Elektron-Exziton-Wechselwirkung (49).

Die in den Wechselwirkungsoperatoren auftretenden Felder sind:

$$\begin{aligned}
 \varphi_k^{\gamma} &= a_k + a_{-k}^{\dagger} & \varphi_k^x &= b_k + b_{-k}^{\dagger} \\
 \chi_k^x &= a_k - a_{-k}^{\dagger} & \chi_k^x &= b_k - b_{-k}^{\dagger}
 \end{aligned}$$

Um eine konsistente Beschreibung zu erhalten, werden der Elektron - Exziton - Wechselwirkung in (51) die nichtresonanten Exzitonoperatoren hinzugefügt.

3.2 DIE GREENSCHEN FUNKTIONEN

Für dieses Modell können drei Greensche Funktionen definiert werden.

$$(52a) \quad D(\vec{p}, t) = -i \langle T \varphi_p^\dagger(t) \varphi_{-p}^\dagger \rangle \quad \text{Photon}$$

$$(52b) \quad E(\vec{p}, t) = -i \langle T \varphi_p^x(t) \varphi_{-p}^x \rangle \quad \text{Exziton}$$

$$(52c) \quad \zeta(\vec{p}, t) = -i \langle T c_p(t) c_p^\dagger \rangle \quad \text{Elektron}$$

Es sind zeitgeordnete temperaturabhängige Greensche Funktionen, die auf dem Imaginärzeitintervall ($0 < t < -i\beta$ mit $\beta=1/k_B T$) definiert sind.

k_B ist die Boltzmannkonstante.

T ist die absolute Temperatur.

Für die Greenschen Funktionen ist räumliche und zeitliche Translationsinvarianz vorausgesetzt, und der Erwartungswert bedeutet eine thermodynamische Mittelung. Für den hochangeregten Halbleiter ist die mittlere Anregungsdichte durch quasichemische Potentiale fixiert und der

Erwartungswert wird mit dem großkanonischen statistischen Operator berechnet.

$$(53) \quad \rho = e^{-\beta K} / \text{Spur}(e^{-\beta K})$$

Es ist

$$(54) \quad K = H - \mu^e N^e - \mu^x N^x$$

mit $N^e, (N^x)$ der Teilchenzahl der Elektronen (Exzitonen).

So bedeutet z.B. die Exziton-Greensche Funktion (52b) zunächst :

$$(55) \quad E(\vec{p}, t-t') = -i \frac{\text{Spur}(T e^{-\beta K} \varphi_p^x(t-t') \varphi_p^x)}{\text{Spur}(e^{-\beta K})}$$

Das Symbol T vor den Feldoperatoren ist der Wicksche Zeitordnungsoperator, der die Operatoren mit "früherer" Zeit nach rechts ordnet.

$$(56) \quad T \varphi_p^x(t-t') \varphi_{-p}^x = \begin{cases} \varphi_p^x(t-t') \varphi_{-p}^x & t-t' > 0 \\ \varphi_{-p}^x \varphi_p^x(t-t') & t-t' < 0 \end{cases}$$

Bei der Vertauschung von Fermioperatoren, kommt es in (56) zusätzlich zu einem Vorzeichenwechsel. Treten im Folgenden zwei Vorzeichen auf, gilt das obere - für Bosonen, das untere - für Fermionen. Eine imaginäre Zeit t ist später als die Zeit t' , wenn t auf der Imaginärzeitachse tiefer liegt als t' .

Die Bewegungsgleichung der temperaturabhängigen Greenschen Funktion kann durch Fourierentwicklung gelöst werden, wenn sie auf dem Imaginärzeitintervall periodisch ist. Um diese Eigenschaft zu zeigen, wird die zyklische Invarianz der Spur ausgenutzt. Die Untersuchung der Exziton - Greenschen Funktion (52b) ergibt für $0 < it' < \beta$:

$$(57) \quad E(\vec{p}, t-t')_{t=0} = e^{\beta\mu^*} E^1(\vec{p}, t-t')_{t=-i\beta} + e^{-\beta\mu^*} E^2(\vec{p}, t-t')_{t=-i\beta}$$

Es ist

$$(57a) \quad E(\vec{p}, t-t') = E^1(\vec{p}, t-t') + E^2(\vec{p}, t-t')$$

mit:

$$(57b) \quad E^1(\vec{p}, t-t') = -i \langle T b_p(t-t') \psi_p^* \rangle$$

$$(57c) \quad E^2(\vec{p}, t-t') = -i \langle T b_p^\dagger(t-t') \psi_{-p}^* \rangle$$

$E(p, t-t')$ ist selbst nicht periodisch, sondern zerfällt in zwei periodische Anteile. Dies kommt dadurch zustande, daß in der Linearkombination $\psi^* = b_p + b_{-p}$ sowohl ein Erzeuger als auch ein Vernichter steht. Man sieht jedoch sofort, daß die Funktion $E(p, t-t')$ für $\mu=0$ periodisch ist. Für $\mu=0$ geht die großkanonische in eine kanonische Mittelung über.

Um die Greenschen Funktionen (52a+b+c) einheitlich zu beschreiben, wird im Folgenden die Mittelung kanonisch durchgeführt. Den aus dieser Rechnung resultierenden Verteilungsfunktionen, werden nachträglich die quasi-chemischen Potentiale hinzugefügt.

Um weitere Eigenschaften der Greenschen Funktion abzuleiten, wird ein beliebiger Propagator untersucht.

$$(58) \quad B(\vec{p}, t-t') = -i \frac{\text{Spur}(T e^{-\beta H} \psi_p(t-t') \psi_p^\dagger)}{\text{Spur}(e^{-\beta H})}$$

Für diese Greensche Funktion gilt :

$$(59) \quad B(\vec{p}, t-t') \Big|_{t=0} = \pm B(\vec{p}, t-t') \Big|_{t=-i\beta}$$

Sie ist auf dem Imaginärzeitintervall periodisch und kann in eine Fourierreihe entwickelt werden [37,48,49].

$$(60) \quad B(\vec{p}, t-t') = \frac{1}{-i\beta} \sum_{\nu} e^{-i z_{\nu}(t-t')} B(\vec{p}, z_{\nu})$$

$z_{\nu} = \pi \nu / (-i\beta)$ ν gerade für Bosonen
 ν ungerade für Fermionen

Es gilt die Orthogonalitätsrelation

$$(61) \quad \int_0^{-i\beta} dt e^{i(z_{\nu} - z_{\nu'})t} = (-i\beta) \delta_{\nu, \nu'}$$

und die Vollständigkeitsrelation.

$$(62) \quad \sum_{\nu} e^{-i z_{\nu}(t-t')} = (-i\beta) \delta(t-t')$$

Anwendenden Orthogonalitätsrelation (61) ermöglicht die Berechnung der Fourierkoeffizienten.

$$(63) \quad B(\vec{p}, z_{\nu}) = \int_0^{-i\beta} dt e^{i z_{\nu}(t-t')} B(\vec{p}, t-t')$$

Das Auftreten des Zeitordnungsoperators T in der temperaturabhängigen Greenschen Funktion (58) führt zu einer Diskontinuität zur Zeit $t=0$. Jedoch lassen sich aus dieser Greenschen Funktion zwei auf dem ganzen Imagi-närzeitintervall analytische Korrelationsfunktionen definieren. Sie sind:

$$(64) \quad B^>(\vec{p}, t-t') = -i \langle \psi_p(t-t') \psi_p^{\dagger} \rangle \quad i(t-t') > 0$$

$$(65) \quad B^<(\vec{p}, t-t') = +i \langle \psi_p^{\dagger} \psi_p(t-t') \rangle \quad i(t-t') < 0$$

Für die Fouriertransformierten dieser Korrelationsfunktionen

$$(66) \quad B^>(\vec{p}, t-t') = \frac{1}{i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t-t')} B^>(\vec{p}, \omega)$$

$$(67) \quad B^<(\vec{p}, t-t') = -\frac{1}{i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t-t')} B^<(\vec{p}, \omega)$$

existiert, auf Grund der zyklischen Invarianz der Spur, ein einfacher Zusammenhang:

$$(68) \quad B^<(\vec{p}, \omega) = e^{-\beta \omega} B^>(\vec{p}, \omega)$$

Wird dieser Zusammenhang bei der Berechnung der Fourierkoeffizienten $B(\vec{p}, z_\nu)$ berücksichtigt, erhält man die Spektraldarstellung der Greenschen Funktion. Aus (63) folgt:

$$\begin{aligned} (69) \quad B(\vec{p}, z_\nu) &= \int_0^{-i\beta} dt e^{i z_\nu (t-t')} B^>(\vec{p}, t-t') \\ &= \frac{1}{i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} B^>(\vec{p}, \omega) \int_0^{-i\beta} dt e^{i(z_\nu - \omega)(t-t')} \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{B^>(\vec{p}, \omega)}{z_\nu - \omega} (1 \mp e^{-\beta \omega}) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{B^>(\vec{p}, \omega) \mp B^<(\vec{p}, \omega)}{z_\nu - \omega} \end{aligned}$$

Die Größe im Zähler

$$(70) \quad A(\vec{p}, \omega) = B^>(\vec{p}, \omega) \mp B^<(\vec{p}, \omega)$$

wird Spektraldichte genannt, und die Fourierkoeffizienten der der temperaturabhängigen Greenschen Funktion lassen sich schreiben:

$$(71) \quad B(\vec{p}, z_\nu) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{R(\vec{p}, \omega)}{z_\nu - \omega}$$

Neben der temperaturabhängigen Greenschen Funktion (58) sind noch weitere bekannt. Vom retardierten Propagator war schon in Kapitel 2 die Rede und die avancierte und Realzeit-Greensche Funktion soll noch hinzugefügt werden. Die Definition von retardierter - und avancierter Greenscher Funktion

$$(72) \quad B(\vec{p}, t-t')^R_A = \mp i \Theta(t-t') \langle [\psi_p(t-t'), \psi_p^\dagger]_{\mp} \rangle$$

R bedeutet retardierte Greensche Funktion

A bedeutet avancierte Greensche Funktion

- steht für Kommutator

+ steht für Antikommutator

und die Realzeit-Greensche Funktion ist

$$(73) \quad B(\vec{p}, t-t') = -i \langle T \psi_p(t-t') \psi_p^\dagger \rangle$$

Im Gegensatz zu (58) sind in (73) die Zeiten t, t' reell. Werden die Greenschen Funktionen (72), (73) durch die Korrelationsfunktionen (64),

(65) (mit reellen Zeiten) ausgedrückt, kommt es zu ähnlichen Spektraldarstellungen. Retardierte und avancierte Greensche Funktion ist,

$$(74) \quad B(\vec{p}, \omega)^R = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{R(\vec{p}, \omega')}{\omega - \omega' \pm i\eta}$$

und die Realzeit Greensche Funktion ist:

$$(75) \quad B(\vec{p}, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} R(\vec{p}, \omega') \left[\frac{(1 + f(\omega'))}{\omega - \omega' + i\eta} - \frac{f(\omega')}{\omega - \omega' - i\eta} \right]$$

$f(\omega) = 1/(e^{\beta\omega} \mp 1)$ ist die Bose- und Fermiverteilungsfunktion.

Die Gleichungen (71), (74) und (75) zeigen, daß bei bekannter Spektraldichte, jede der definierten Greenschen Funktionen ausgerechnet werden kann. Weiter ist interessant, daß alle vier Greensche Funktionen eine gemeinsame analytische Fortsetzung besitzen.

$$(76) \quad B(\vec{p}, z) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{R(\vec{p}, \omega)}{z - \omega}$$

Anwenden der Dirac-Identität

$$(77) \quad \frac{1}{\omega - \omega' \pm i\eta} = \frac{P}{\omega - \omega'} \mp i\pi \delta(\omega - \omega')$$

auf die analytische Fortsetzung (76), ergibt eine Vorschrift zur Berechnung der Spektraldichte.

$$(78) \quad A(\vec{p}, \omega) = i \left[B(\vec{p}, z)_{z=\omega+i\eta} - B(\vec{p}, z)_{z=\omega-i\eta} \right]$$

Wir sind nun in der Lage für ein betrachtetes System eine beliebige Greensche Funktion (z.B. die retardierte Photon-Greensche Funktion) auszurechnen. Dazu wird die Bewegungsgleichung der temperaturabhängigen Greenschen Funktion gelöst, für die es wohldefinierte Näherungsmethoden gibt. Durch analytische Fortsetzung der temperaturabhängigen Greenschen Funktion kann die Spektraldichte berechnet werden. Mit dieser ist jede andere Greensche Funktion bekannt. Für die Selbstenergie kann eine analoge Untersuchung durchgeführt werden. Auch hier zeigt sich, daß die Kenntnis der temperaturabhängigen Selbstenergie $\Sigma(p, z)$ auf eine analytische Fortsetzung

$$(79) \quad \Sigma(\vec{p}, z) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{T(\vec{p}, \omega)}{z - \omega}$$

führt, aus der jede andere Selbstenergie (wie z.B. die retardierte Selbstenergie)

$$(80) \quad \Sigma(\vec{p}, \omega)^R = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{T(\vec{p}, \omega')}{\omega - \omega' + i\eta} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{T(\vec{p}, \omega')}{\omega - \omega'} - \frac{i}{2} T(\vec{p}, \omega)$$

berechnet werden kann.

Im nächsten Kapitel werden die gekoppelten Bewegungsgleichungen der temperaturabhängigen Photon-, Exziton- und Elektron-Greenschen Funktion, unter Verwendung der Variationsableitungsmethode, aufgestellt.

4. DIE GEKOPPELTEN GLEICHUNGEN

4.1 METHODEN ZUR BERECHNUNG GREENSCHER FUNKTIONEN

Zur Berechnung Greenscher Funktionen gibt es eine Reihe von Methoden. Erwähnt seien hier die Feynman-Dyson-Entwicklung, die Bewegungsgleichungsmethode und die Variationsableitungsmethode. Bei der Feynman - Dyson - Entwicklung [48-50] , wird der Hamiltonoperator in einen exakt lösbaren Anteil H_0 und eine Störung H_1 zerlegt. Durch Übergang ins Wechselwirkungsbild tritt in der Greenschen Funktion die S-Matrix auf. Dies führt zu einer Reihenentwicklung des Propagators. Die in der Reihe auftretenden höheren Korrelationsfunktionen werden mit Hilfe des Wickschen Theorems zu freie Greensche Funktionen kontrahiert und können graphisch dargestellt werden. Berücksichtigung finden nur verbundene und topologisch verschiedene Graphen. Wird eine bestimmte Klasse von Graphen bis in jede Ordnung aufsummiert, kommt es für die Greensche Funktion zu einer selbstkonsistenten Gleichung. Die Selbstenergien werden jedoch nur mit freien Propagatoren gebildet.

Bei der Bewegungsgleichungsmethode [51] wird die zeitliche Entwicklung der Greenschen Funktion untersucht. In der Bewegungsgleichung des Propagators treten meistens höhere Korrelationsfunktionen auf. Für diese können wieder Bewegungsgleichungen aufgestellt werden, die aber an noch höhere Korrelationsfunktionen koppeln. So erhält man eine infinite Hierarchie von Gleichungen, die irgendwie abgebrochen werden muß. Es kann gezeigt werden, daß solche Entkopplungsnaherungen zu einer teilweisen Summation einer Störungsreihe äquivalent sind. Unbefriedigend bleibt aber die Tatsache, daß durch den Entkopplungsvorgang eine gewisse Willkür

entsteht, die Unsicherheiten über den Gültigkeitsbereich aufkommen lassen.

Die Variationsableitungsmethode bietet die Möglichkeit höhere Korrelationsfunktionen systematisch weiterzubehandeln. Sie wurde von Martin und Schwinger [36] eingeführt und von Baym and Kadanoff [37] und anderen [38] weiterentwickelt. Es kommt zu selbstkonsistenten Gleichungen der Greenschen Funktionen und zu Selbstenergien, die aus renormierten Propagatoren gebildet werden. Die Methode führt zur Definition verallgemeinerter Wechselwirkungen, die auch Vertex - Funktionen genannt werden. Die Bewegungsgleichungen dieser Vertex-Funktionen sind nicht abgeschlossen. Jedoch ist der Vertex proportional zur Selbstenergie, so daß der Fehler beim Abbrechen der Hierarchie nicht von so großer Bedeutung ist. Allerdings müssen gewisse Symmetriebedingungen erfüllt werden, auf die in Abschnitt 4.5 genauer eingegangen wird.

Ausgangspunkt der Variationsableitungsmethode ist die Kopplung des Systems an äußere Felder, die nach der Rechnung wieder Null gesetzt werden können. Durch den Übergang ins Wechselwirkungsbild bezüglich der äußeren Störung, kommt es zu einer Verallgemeinerung der Greenschen Funktion (58), die im Weiteren betrachtet wird.

$$(81) \quad B(\vec{p}, t-t') = -i \frac{\langle TS \psi_p(t-t') \psi_p \rangle}{\langle TS \rangle}$$

Die S-Matrix enthält den Hamiltonoperator der äußeren Störung. Es wird bemerkt, daß die Propagatoren (58) und (81) die gleichen Randbedingungen erfüllen. Deshalb kann auch die Greensche Funktion (81) durch Fourierentwicklung gelöst werden. Für das vorliegende Problem läßt sich der Erwartungswert der S-Matrix wie folgt definieren:

$$(82) \quad \langle TS \rangle = \langle T e^{-i \{ H(1) \varphi_{(1)}^{\dagger} + I(1) \varphi_{(1)}^{\dagger} + J(1,1') S(1,1')^{\dagger} \}} \rangle$$

Es ist

$$(83) \quad S(1,1')^{\dagger} = S(1,1') = C(1)C(1') \quad \text{und} \quad \varphi_{(1)}^{\dagger} = \varphi_{(-1)}^{\dagger}$$

Impulse und Zeiten werden zusammengefaßt $\pm p, t = \pm 1$ und es gilt die Summenkonvention, daß über doppelt auftretende Indizes zu summieren bzw. zu integrieren ist. Die Integration über die imaginäre Zeit erstreckt sich von $0 \leq t \leq -i\beta$.

$H(1), I(1)$ und $J(1,1')$ sind äußere Felder, die an die Feldoperatoren des Systems koppeln. H koppelt an die Photonen, I an die Exzitonen und J an die Elektrondichte. Durch Variationsableitung der S -Matrix nach den äußeren Feldern, werden Potenzen der zugehörigen Feldoperatoren erzeugt.

$$(84a) \quad \frac{\delta S}{\delta H(1)} = S \left[-i \frac{\delta H(1')}{\delta H(1)} \varphi_{(1')}^{\dagger} \right] = -i S \varphi_{(-1)}^{\dagger}$$

$$(84b) \quad \frac{\delta S}{\delta I(1)} = S \left[-i \frac{\delta I(1')}{\delta I(1)} \varphi_{(1')}^{\dagger} \right] = -i S \varphi_{(-1)}^{\dagger}$$

$$(84c) \quad \frac{\delta S}{\delta J(1,2)} = S \left[-i \frac{\delta J(1',2')}{\delta J(1,2)} S(2',1')^{\dagger} \right] = -i S S(1,2)$$

Es gilt:

$$\frac{\delta H(1)}{\delta H(2)} = \frac{\delta I(1)}{\delta I(2)} = \delta(1,2) \quad ; \quad \frac{\delta J(1,2)}{\delta J(3,4)} = \delta(1,3) \delta(2,4)$$

Die Variationsableitung nach verschiedenen äußeren Feldern verschwindet,

$$\text{z.B.} \quad \frac{\delta H(1)}{\delta I(2)} = 0$$

und die δ -Funktion bedeutet. $\delta(1,2) = \delta_{P_1, P_2} \delta(t_1 - t_2)$

Wegen (84) kann der Erwartungswert der S-Matrix als erzeugenden Funktion beliebiger Korrelationsfunktionen benutzt werden. An tiefster Stelle der Hierarchie stehen die Einpunktfunktionen der Photonen und Exzitonen,

$$(85a) \quad D(1) = i \frac{\delta \ln \langle TS \rangle}{\delta H(-1)} = \frac{\langle TS \varphi^*(1) \rangle}{\langle TS \rangle}$$

$$(85b) \quad E(1) = i \frac{\delta \ln \langle TS \rangle}{\delta I(-1)} = \frac{\langle TS \varphi^*(1) \rangle}{\langle TS \rangle}$$

und die Elektron-Greensche Funktion

$$(85c) \quad G(1,2) = - \frac{\delta \ln \langle TS \rangle}{\delta J(2,1)} = -i \frac{\langle TS c(1) c^\dagger(2) \rangle}{\langle TS \rangle}$$

Aus den Einpunktfunktionen der Photonen (85a) und Exzitonen (85b) werden die Einteilchen-Greenschen Funktionen durch eine weitere Funktionalableitung, nach den entsprechenden äußeren Feldern erhalten,

$$(86a) \quad D(1,2) = \frac{\delta D(1)}{\delta H(2)} = -i \left\{ \frac{\langle TS \varphi_{(1)}^* \varphi_{(-2)}^* \rangle}{\langle TS \rangle} - D(1) D(-2) \right\}$$

$$(86b) \quad E(1,2) = \frac{\delta E(1)}{\delta I(2)} = -i \left\{ \frac{\langle TS \varphi_{(1)}^* \varphi_{(-2)}^* \rangle}{\langle TS \rangle} - E(1) E(-2) \right\}$$

Werden die äußeren Felder Null gesetzt, reduzieren sich die Einteilchen-Greenschen Funktionen (85c), (86a) und (86b) auf die üblichen (52a), (52b) und (52c). Dabei wird vorausgesetzt das keine Symmetriebrechung existiert, so daß für verschwindende äußere Felder auch die Einpunktfunktionen gegen Null streben. Dies ist nicht immer der Fall, da z.B. in Situationen, in denen es zu Lasertätigkeit kommt, die Einpunktfunktionen endlich bleiben.

4.2 PHOTON- UND EXZITON-EINPUNKTFUNKTION

Mit dem Hamiltonoperator (51) werden die Bewegungsgleichungen der Einpunktfunktionen (85a+b) aufgestellt. In diesen treten höhere Korrelationsfunktionen auf, die durch Variationsableitungen ausgedrückt werden. Beim Aufstellen der Bewegungsgleichungen ist darauf zu achten, daß die Zeitableitung an dem Zeitordnungsoperator vorbeigezogen werden muß. Die Photon-Einpunktfunktion hat die Struktur

$$[TS \varphi_{(1)}^*] = \left[T e^{-i \int_{t_1}^{\beta} (\dots)} \right] \varphi_{(1)}^* \left[T e^{-i \int_0^{t_1} (\dots)} \right]$$

Die erste Zeitableitung dieses Ausdruckes ergibt:

$$\frac{\partial}{\partial t_1} [TS \varphi_{(1)}^*] = TS \dot{\varphi}_{(1)}^*$$

Dies kommt dadurch zustande, da der Kommutator $[\varphi_{(1)}^*, \varphi_{(2)}^*]$ verschwindet. Jedoch ist $\dot{\varphi}_{(1)}^*$ mit dem konjugierten Feld $\chi_{(1)}^*$ verknüpft

$$\dot{\varphi}_{(1)}^* = \frac{\omega_{k_1}^*}{i} \chi_{(1)}^*$$

und es ist

$$\frac{\partial}{\partial t_1} [TS \chi_{(1)}^*] = -i 2 H_{(1)} TS + TS \dot{\chi}_{(1)}^*$$

Die zweifache Zeitableitung ergibt:

$$-\frac{\partial^2}{\partial t_1^2} [TS \varphi_{(1)}^*] = 2 \omega_{k_1}^* H_{(1)} - TS \ddot{\varphi}_{(1)}^*$$

Für die Exziton-Einpunktfunktion kann eine entsprechende Untersuchung vorgenommen werden, und es kommt zu den Bewegungsgleichungen:

$$(87a) \quad -\frac{\partial^2}{\partial t_1^2} D_{(1)} = 2 \omega_{k_1}^* H_{(1)} - \frac{\langle TS \ddot{\varphi}_{(1)}^* \rangle}{\langle TS \rangle}$$

$$(87b) \quad -\frac{\partial^2}{\partial t_1^2} E_{(1)} = 2 \omega_{k_1}^* I_{(1)} - \frac{\langle TS \ddot{\varphi}_{(1)}^* \rangle}{\langle TS \rangle}$$

Die Ableitung der Feldoperatoren sind durch die Heisenbergschen Bewegungsgleichungen gegeben:

$$(88a) \quad i\dot{\varphi}(1) = \omega_1^* \chi(1)$$

$$(88b) \quad i\dot{\chi}(1) = \omega_1^* \varphi(1) + 2A_1 \varphi(1) + 2B_1 \chi(1)$$

$$(88c) \quad i\dot{\varphi}^*(1) = \omega_1^* \chi^*(1) - 2B_1 \varphi^*(1)$$

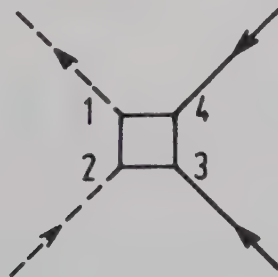
$$(88d) \quad i\dot{\chi}^*(1) = \omega_1^* \varphi^*(1) + 2U(1'2',3'-1)C^\dagger(1')C(2')\varphi^*(3')$$

$$(88e) \quad i\dot{C}(1) = \omega^c C(1) + \frac{1}{2} U(11',2'3')C(1')\varphi(2')\varphi(3')$$

Diese kompakte Schreibweise kommt zustande, da die Elektron-Exziton-Wechselwirkung U (49) verallgemeinert wird.

$$(89) \quad U(12,34) = U \delta_{k_1-k_2, k_3+k_4} \delta(t_1-t_2) \delta(t_1-t_3) \delta(t_1-t_4)$$

Die graphische Darstellung dieser Wechselwirkung ist:



Die gestrichelten Linien bedeuten Elektronen und die durchgezogenen - Exzitonen. Der Einfachheit halber wird $(\omega_{k_1}, A_{k_1}, B_{k_1} \rightarrow \omega_1, A_1, B_1)$ bezeichnet. Einsetzen von (88a+b) in (87a) gibt die Bewegungsgleichung der Photon-Einpunktfunktion.

$$(90) \quad -\frac{1}{2\omega_1^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial t_1^2} + (\omega_1^*)^2 \right) D(1) = H(1) + A_1 D(1) + \frac{\langle TS \chi^x(1) \rangle}{\langle TS \rangle}$$

Wird die Inverse einer Greenschen Funktion eingeführt z.B. die Inverse der Photon-Greenschen Funktion,

$$(91) \quad \bar{D}^{-1}(1,1') D(1',2) = D(1,1') \bar{D}^{-1}(1',2) = \delta(1,2)$$

kann die Gleichung auf die Form gebracht werden:

$$(92) \quad \bar{D}_0^{-1}(1,1') D(1') = \tilde{H}(1)$$

dabei ist $\bar{D}_0^{-1}$ die Inverse des freien Photon-Propagators

$$(92a) \quad \bar{D}_0^{-1}(1,2) = -\frac{1}{2\omega_1^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial t_1^2} + (\omega_1^*)^2 \right) \delta(1,2)$$

und $\tilde{H}$ ein effektives Feld in dem alle Korrekturen enthalten sind.

$$(92b) \quad \tilde{H}(1) = H(1) + i \frac{B_1}{\omega_1^*} \dot{E}(1)$$

Die Korrektur $\tilde{H}(1)$ kommt zustande, da $\chi^x(1)$ in (90) durch $\dot{\psi}^x(1)$ und

$\varphi^x(1)$ (gemäß Gleichung (88c)) ausgedrückt wird. Auf diese Weise kommt es zur Kompensation des Ausdruckes proportional zu A_1 .

Wird die Bewegungsgleichung für die Exziton-Einpunktfunktion aufgestellt (88c+d in 87b)

$$(93) \quad -\frac{1}{2\omega_1^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial t_1^2} + (\omega_1^*)^2 \right) E(1) = I(1) - i \frac{B_1}{\omega_1^*} \dot{D}(1) \\ + U(1'2',3'-1) \frac{\langle TS c^\dagger(1) c(2') \varphi^x(3') \rangle}{\langle TS \rangle}$$

tritt eine neue Korrelationsfunktion $\langle TSc^+(1)c(2)\varphi^x(3) \rangle / \langle TS \rangle$ auf, die durch Variationsableitung der Elektron-Greenschen Funktion nach dem äußeren Feld I berechnet werden kann.

$$(94) \quad \frac{\langle TS c^\dagger(1) c(2) \varphi^x(3) \rangle}{\langle TS \rangle} = \frac{\delta G(2,1)}{\delta I(-3)} - i G(2,1) E(3)$$

Einsetzen der Korrelatonsfunktion (94) in die Bewegungsgleichung (93) führt auf die Exziton-Einpunktfunktion.

$$(95) \quad E_0^{-1}(1,1') E(1') = \tilde{I}(1)$$

mit E_0^{-1} ist die Inverse der freien Exziton-Greenschen Funktion

$$(95a) \quad E_0^{-1}(1,2) = -\frac{1}{2\omega_1^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial t_1^2} + (\omega_1^*)^2 \right) \delta(1,2) + U(1'2',2-1) G(2',1')$$

und I dem effektiven Feld

$$(95b) \quad \tilde{I}(1) = I(1) - i \frac{\beta_1}{\omega_1} D(1) + U(1'2',3'-1) \frac{\delta G(2',1')}{\delta I(-3')}$$

Der Hartreeterm wird hier in die Greensche Funktion E_0^{-1} inkorporiert.

4.3 ELEKTRON-, PHOTON- UND EXZITON-GREENSCHE FUNKTION

Zur Zeitableitung der Elektron-Greenschen Funktion ist zu berücksichtigen

$$i \frac{\partial}{\partial t_1} [TS C(1)] = J(1,2') C(2') TS + TS i \dot{C}(1)$$

und

$$i \frac{\partial}{\partial t_1} [TS C(1) C^\dagger(2)] = i \delta(1,2) TS + J(1,2') TS C(2') C^\dagger(2) + TS i \dot{C}(1) C^\dagger(2)$$

Dies führt auf die Bewegungsgleichung der Elektron-Greenschen Funktion

$$(96) \quad \left[i \frac{\partial}{\partial t_1} \delta_{(1,1')} - J_{(1,1')} \right] G_{(1',2)} = \delta_{(1,2)} - i \frac{\langle T S i c_{(1)} c_{(2)}^\dagger \rangle}{\langle T S \rangle}$$

Zur Berechnung der Elektron-Greenschen Funktion wird (88e) in (96) eingesetzt. In dieser Bewegungsgleichung

$$(97) \quad \left[\left(i \frac{\partial}{\partial t_1} - \omega_1^e \right) \delta_{(1,1')} - J_{(1,1')} \right] G_{(1',2)} = \delta_{(1,2)} - \frac{i}{2} U_{(11',2'3')} \frac{\langle T S c_{(1')} c_{(2)}^\dagger \varphi_{(2')}^* \varphi_{(3')}^* \rangle}{\langle T S \rangle}$$

tritt eine Korrelationsfunktion auf, die in Variationsableitungen, der Elektron-Greenschen Funktion nach dem äußeren Feld I , umgeformt werden kann.

$$(98) \quad -i \frac{\langle T S c_{(1)} c_{(2)}^\dagger \varphi_{(3)}^* \varphi_{(4)}^* \rangle}{\langle T S \rangle} = - \frac{\delta^2 G_{(1,2)}}{\delta I_{(-4)} \delta I_{(-3)}} + i \frac{\delta G_{(1,2)}}{\delta I_{(-3)}} E_{(4)} + i \frac{\delta G_{(1,2)}}{\delta I_{(-4)}} E_{(3)} + i G_{(1,2)} E_{(3,-4)} + G_{(1,2)} E_{(3)} E_{(4)}$$

Wird dies in die Bewegungsgleichung (97) eingesetzt, resultiert:

$$(99) \quad G_0^{-1}(1,1') G(1',2) = \delta(1,2) + \Sigma(1,1') G(1',2)$$

Es ist G_0^{-1} die Inverse der freien Elektron-Greenschen Funktion

$$(99a) \quad G_0^{-1}(1,2) = (i \frac{\partial}{\partial t_1} - \omega_1^e) \delta(1,2) - \tilde{J}(1,2)$$

Mit $\tilde{J}(1,2)$ dem effektiven Feld

$$(99b) \quad \tilde{J}(1,2) = J(1,2) + \frac{i}{2} U(12,1'2') [E(1',2') - i E(1') E(2')]]$$

und der Selbstenergie.

$$(99c) \quad \Sigma(1,1') G(1',2) = -\frac{1}{2} U(11',3'2') \left[\frac{\delta^2}{\delta I(-2') \delta I(-3')} - 2i E(3') \frac{\delta}{\delta I(-2')} \right] G(1',2)$$

Zur Berechnung der Photon-, Exziton-Greenschen Funktion und der verallgemeinerten Wechselwirkungen ist es zweckmäßig von der Variationsableitung, nach den äußeren Feldern, auf die Variationsableitung bezüglich der Einpunktfunktionen umzusteigen. Es gilt z.B.:

$$(100) \quad \left(\frac{\delta G(1,2)}{\delta I(3)} \right)_{H,J} = \left(\frac{\delta G(1,2)}{\delta E(1')} \right)_{H,J} \left(\frac{\delta E(1')}{\delta I(3)} \right)_{H,J} = \frac{\delta G(1,2)}{\delta E(1')} E(1',3)$$

Dies führt auf eine Reihe von Kettenregeln, von denen im Folgenden häufig Gebrauch gemacht wird.

$$(101a) \quad \delta / \delta I(1) = E(1',1) \delta / \delta E(1')$$

$$(101b) \quad \delta / \delta H(1) = D(1',1) \delta / \delta D(1')$$

$$(101c) \quad \delta / \delta H(1) = (\delta E(1') / \delta H(1')) \delta / \delta E(1')$$

Die Photon-Greensche Funktion wird durch Variationsableitung der Photon-Einpunktfunktion (92) nach dem äußeren Feld H erhalten.

$$(102) \quad D_0^{-1}(1,1') D(1',2) = \delta(1,2) + i \frac{B_1}{\omega_1^*} \frac{\partial}{\partial t_1} \frac{\delta E(1)}{\delta H(1')} D^{-1}(1',2') D(2',2)$$

Die Korrelationsfunktion $\delta E(1)/\delta H(2)$ legt die Photon-Selbstenergie fest. Zur Bestimmung dieser Korrelationsfunktion wird die Exziton - Einpunktfunktion (95) nach $H(2)$ abgeleitet. Unter Verwendung von (101a) und (101c) kommt es zu einer selbstkonsistenten Gleichung für diese Funktion. Multiplikation dieser Gleichung mit der Inversen Photon-Greenschen Funktion ergibt:

$$(102a) \quad \Pi^*(1,2) = i \frac{B_1}{\omega_1^*} \frac{\partial}{\partial t_1} \widetilde{\Pi}^*(1,2)$$

mit

$$(102b) \quad \widetilde{\Pi}^*(1,2) = \frac{\delta E(1)}{\delta H(1')} D^{-1}(1',2)$$

und:

$$(102c) \quad \widetilde{\Pi}^*(1,2) = + i \frac{\partial}{\partial t_2} E_0(1,2) \frac{B_2}{\omega_2^*}$$

$$- i E_0(1,1') U(3'4',2'-1') E(2') \frac{\delta G(4',3')}{\delta I(5')} E^{-1}(5',6') \widetilde{\Pi}^*(6',2)$$

$$+ E_0(1,1') U(2'3',4'-1') \frac{\delta^2 G(3',2')}{\delta I(4') \delta I(5')} E^{-1}(5',6') \widetilde{\Pi}^*(6',2)$$

Nach Ableiten der Exziton-Einpunktfunktion (95) nach dem äußeren Feld I, resultiert die Bewegungsgleichung der Exziton-Greenschen Funktion.

$$(103) \quad \begin{aligned} E_0^{-1}(1,1') E(1',2) &= \delta(1,2) - i \frac{B_1}{\omega_1^*} \frac{\partial}{\partial t_1} \frac{\delta D(1)}{\delta I(4')} E^{-1}(4',5') E(5',2) \\ &- i U(2'3',4'-1') E(1') \frac{\delta G(3',2')}{\delta I(4')} E^{-1}(4',5') E(5',2) \\ &+ U(1'2',3'-1) \frac{\delta^2 G(2',1')}{\delta I(4') \delta I(-3')} E^{-1}(4',5') E(5',2) \end{aligned}$$

Die hier auftretende Korrelationsfunktion $\delta D(1)/\delta I(2)$ erhält man aus der Bewegungsgleichung der Photon-Einpunktfunktion (92).

$$(103a) \quad \frac{\delta D(1)}{\delta I(2)} = -i \frac{\partial}{\partial t_1} D_0(1,1') \frac{B_1}{\omega_1^*} E(1',2)$$

Durch Einsetzen dieser Größe resultiert die Exziton-Selbstenergie.

$$(103b) \quad \begin{aligned} \Pi^*(1,2) &= i \frac{\partial}{\partial t_1} i \frac{\partial}{\partial t_2} \frac{B_1}{\omega_1^*} D_0(1,2) \frac{B_2}{\omega_2^*} \\ &- i U(2'3',4'-1) E(1') \frac{\delta G(3',2')}{\delta I(4')} E^{-1}(4',2) \end{aligned}$$

$$+ U(1'2', 3'-1) \frac{\delta \bar{G}(2,1')}{\delta I(4') \delta I(-3')} E^{-1}(4', 2)$$

4.4 DAS GLEICHUNGSSYSTEM DES HOCHANGEREGETEN HALBLEITERS

Die in den Selbstenergien (99c), (102a) und (103b) auftretenden Variationsableitung der Elektron-Greenschen Funktion nach dem äußeren Feld I , werden gemäß (100) durch Variationsableitungen bezüglich der Exziton-Einpunktfunktion ersetzt. Abwälzen der Variationsableitung auf die inverse Elektron-Greensche Funktion (91), führt auf die Definition verallgemeinerter Wechselwirkungen.

$$(104) \quad \frac{\delta G(1,2)}{\delta E(3)} = G(1,1') T_3(1'2', 3) G(2', 2)$$

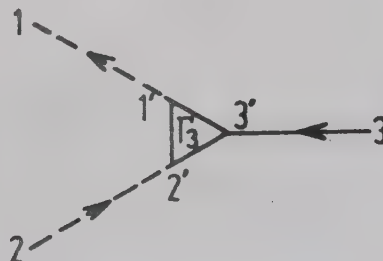
Es ist:

$$(105) \quad T_3(12, 3) = - \frac{\delta G^{-1}(1,2)}{\delta E(3)}$$

Wird (104) in (100) eingesetzt

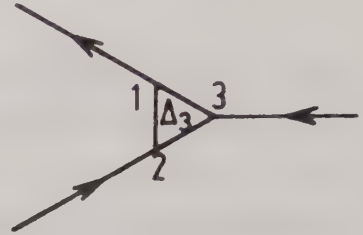
$$(106) \quad \frac{\delta G(1,2)}{\delta I(3)} = G(1,1') G(2', 2) T_3(1'2', 3') E(3', 3)$$

und graphisch dargestellt:



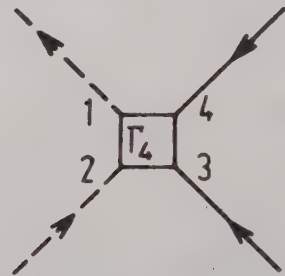
ist offensichtlich, daß Γ_3 eine verallgemeinerte Elektron-Exziton- Wechselwirkung darstellt. Neben diesem Elektron-Exziton-Vertex kommt es in den Bewegungsgleichungen auch zu einem Exziton-Exziton-Vertex. Er ist definiert:

$$(107) \quad \Delta_3(12,3) = - \frac{\delta E^{-1}(1,2)}{\delta E(3)}$$



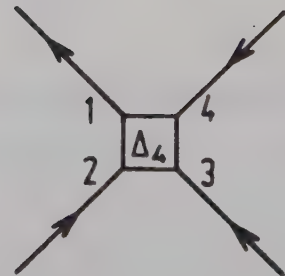
Die Variationsableitung dieser verallgemeinerten Wechselwirkungen erzeugen Vertices höherer Ordnung

$$(108) \quad T_4(12,34) = \frac{\delta \Gamma_3(12,3)}{\delta E(4)}$$



und

$$(109) \quad \Delta_4(12,34) = \frac{\delta \Delta_3(12,3)}{\delta E(4)}$$



Die zweifache Variationsableitung der Elektron-Greenschen Funktion ist:

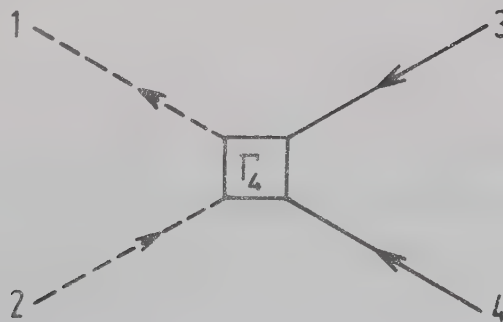
$$(110) \quad \frac{\delta^2 G_{(1,2)}}{\delta \bar{I}_{(4)} \delta \bar{I}_{(3)}} = \frac{\delta}{\delta I_{(4)}} \left[G_{(1,1')} G_{(2,2)} E_{(3,3)} T_3'(1'2',3') \right] \\ = \frac{\delta}{\delta E_{(4')}} \left[G_{(1,1')} G_{(2,2)} E_{(3,3)} T_3'(1'2',3') \right] E_{(4',4)}$$

Das gibt vier Summanden:

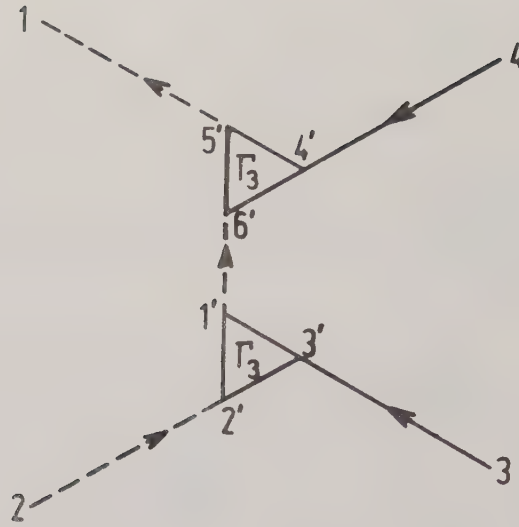
$$(111) \quad \frac{\delta^2 G_{(1,2)}}{\delta \bar{I}_{(4)} \delta \bar{I}_{(3)}} = G_{(1,1')} G_{(2,2)} T_4'(1'2',3'4') E_{(3,3)} E_{(4',4)} \\ + G_{(1,5')} T_3'(5'6',4') E_{(4',4)} G_{(6',1')} T_3'(1'2',3') G_{(2,2)} E_{(3,3)} \\ - G_{(1,1')} T_3'(1'2',3') E_{(3,3)} G_{(2,5')} T_3'(5'6',4') G_{(6',2)} E_{(4',4)} \\ - G_{(1,1')} G_{(2,2)} T_3'(1'2',3') E_{(3,5')} \Delta_3(5'6',4') E_{(6',3)} E_{(4',4)}$$

Die zugehörigen Graphen sind:

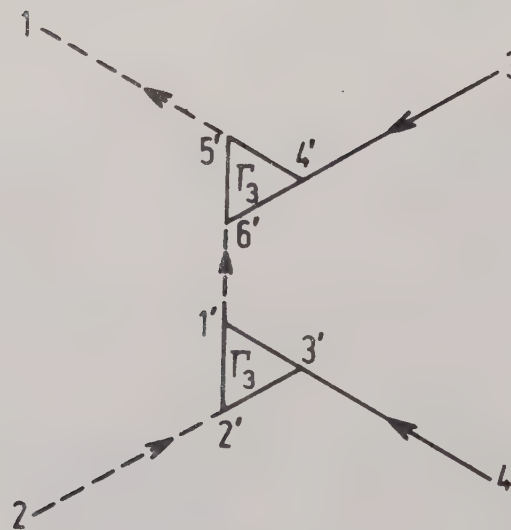
(111a)



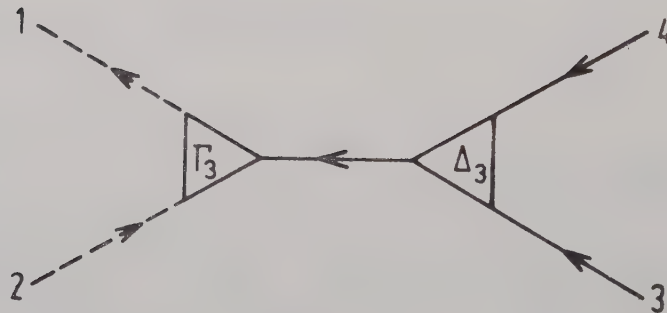
(111b)



(111c)



(111d)



Um die Bewegungsgleichungen der Vertexfunktionen aufzustellen, werden Funktionalableitungen der inversen Exziton- und Elektron-Greenschen Funktion (103), (99) ausgeführt. Am Ende werden alle äußeren Felder Null ge-

setzt. Unter der Annahme, daß keine Symmetriebrechung existiert, verschwinden alle Einpunktfunktionen und die Vertices Γ_3 und Δ_3 . So überlebt nur der erste Summand in (111) und der resultierende Satz von Bewegungsgleichungen lautet:

Die Photon-Dyson-Gleichung

$$(112) \quad D(1,2) = D_0(1,2) + D_0(1,1') \Pi^{\sigma}(1',2') D(2',2)$$

mit der Photon-Selbstenergie

$$(112a) \quad \Pi^{\sigma}(1,2) = i \frac{\partial}{\partial t_1} \frac{B_1}{\omega_1^*} \widetilde{\Pi}^{\sigma}(1,2)$$

und

$$(112b) \quad \begin{aligned} \widetilde{\Pi}^{\sigma}(1,2) = & i \frac{\partial}{\partial t_2} E_0(1,2) \frac{B_2}{\omega_2^*} \\ & + E_0(1,4') U(1'2',3'-4') G(1',1') G(2',6') E(3',5') T_4(6'7',8'-5') \widetilde{\Pi}^{\sigma}(8',2) \end{aligned}$$

Die Exziton-Dyson-Gleichung

$$(113) \quad E(1,2) = E_0(1,2) + E_0(1,1') \Pi^x(1',2') E(2',2)$$

mit der Exziton-Selbstenergie

$$(113a) \quad \begin{aligned} \Pi^x(1,2) = & i \frac{\partial}{\partial t_1} i \frac{\partial}{\partial t_2} \frac{B_1}{\omega_1^*} D_0(1,2) \frac{B_2}{\omega_2^*} \\ & + U(1'2',3'-1) G(5',1') G(2',4') E(3',6') T_4'(4'5',2-6') \end{aligned}$$

Die Elektron-Dyson-Gleichung

$$(114) \quad G(1,2) = G_0(1,2) + G_0(1,1') \Sigma(1',2') G(2',2)$$

mit der Elektron-Selbstenergie

$$(114a) \quad \Sigma(1,2) = -\frac{1}{2} U(11';2'3') G(1',4') E(6',2') E(3',5') T_4(4'2,-5'6')$$

Zur Veranschaulichung des komplexen gekoppelten Gleichungssystems wird es in Abb.4 graphisch dargestellt.

Die verwendeten Symbole bedeuten:

	renormiertes Photon
	renormiertes Exziton
	renormiertes Elektron

Die freien Propagatoren sind durch einfache Linien gekennzeichnet.

	ist das Matrixelement B_i/ω_i	
	ist die Zeitableitung $i\partial/\partial t_i$	
	ist das Elektron-Exziton-Matrixelement	(89)
	ist der Elektron-Exziton-Vertex	(108)

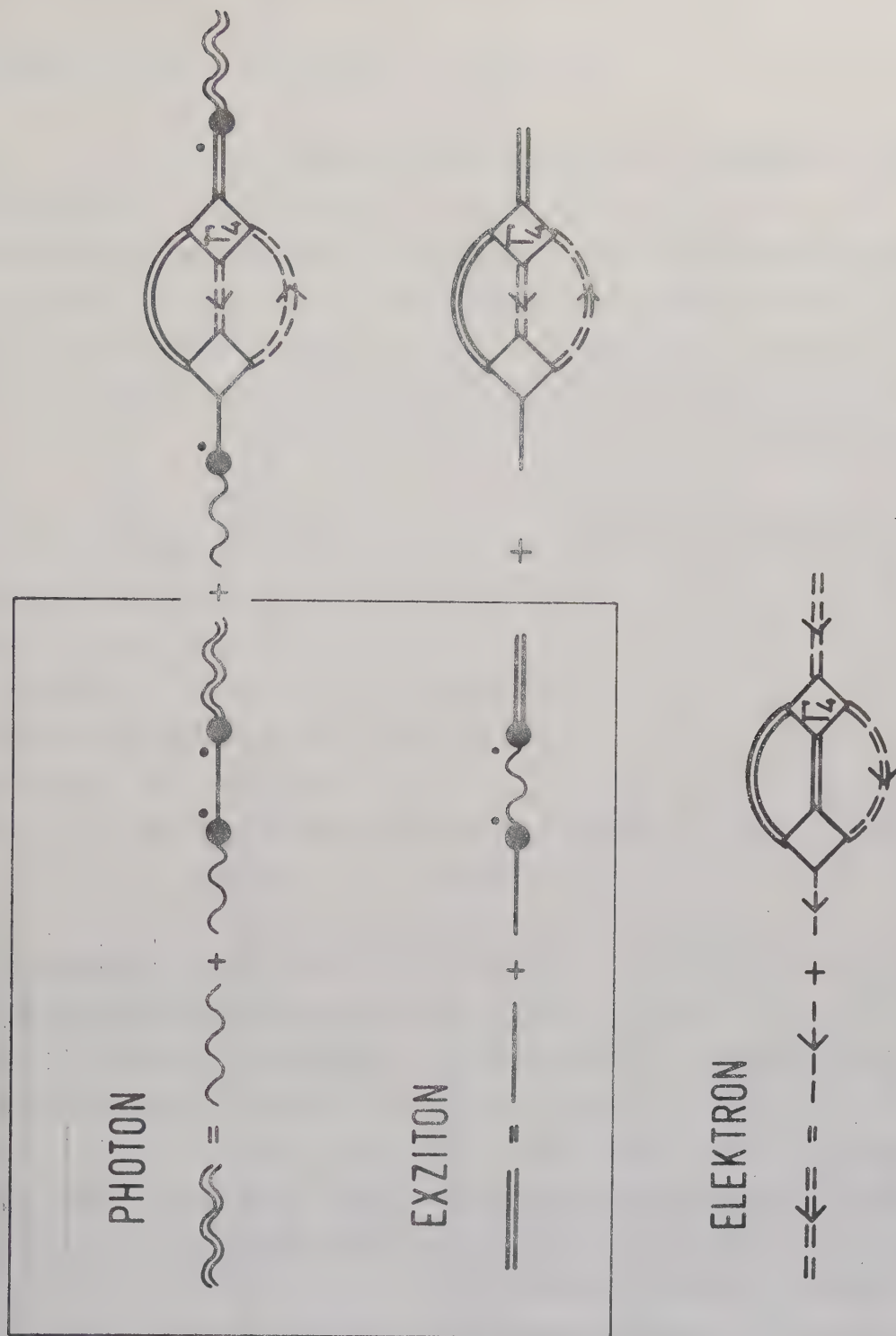


Abbildung 4. Das gekoppelte Gleichungssystem

Zu Abb.4 sollen drei Bemerkungen gemacht werden.

a)Der eingerahmte Teil repräsentiert das wechselwirkende Exziton und Photon. Die Renormierung geschieht durch freie Propagatoren, wodurch dieses Gleichungssystem exakt gelöst werden kann. Die Photon-Selbstenergie und somit die dielektrische Funktion ist reell, so daß der zugehörige Absorptionskoeffizient δ -förmig ist.

b)Zu Absorptionsbanden kommt es erst, durch die Ankopplung der Elektronen an die Exzitonen. Die Elektronen wirken über den Elektron - Exziton - Streuprozess auf die Photonen ein. Ausdruck für die berücksichtigten Übergänge ist der Selbstenergiegraph des dritten Summanden der Photon-Dyson-Gleichung. Ein virtuelles Exziton wird dort durch die Elektron-Exziton-Streuung in ein reelles verwandelt, das im Kristall propagiert. Dies ist der Absorptionsprozess (siehe Abb.2b). Der inverse Prozeß liefert die stimulierte Emission (siehe Abb.2a).

c)In diesen Gleichungen ist die einzig noch verbleibende Unbekannte der Elektron-Exziton-Vertex Γ_4 . Wäre Γ_4 bekannt, läge im Prinzip ein exaktes Gleichungssystem vor. Doch die Bewegungsgleichung von Γ_4 koppelt an den Exziton-Exziton-Vertex Δ_4 und an den höheren Vertex Γ_6 , für die wieder Bewegungsgleichungen aufzustellen sind. Dies führt auf eine ganze Hierarchie von Vertex-Gleichungen, die nicht mehr exakt gelöst werden können. Es ist deshalb notwendig geeignete Näherungen für Γ_4 zu finden. Dies geschieht im nächsten Abschnitt.

4.5 BERECHNUNG DER VERTEX-FUNKTIONEN

Unter der Voraussetzung, daß die äußeren Felder noch endlich sind, wird die Bewegungsgleichung von Γ_4 aufgestellt. Zweifache Variationsableitung der inversen Elektron-Greenschen Funktion (99) bezüglich der Exziton-Einpunktfunktion E ergibt, einen länglichen Ausdruck, der explizit in Anhang A1 gegeben ist. In diesem Ausdruck tritt die verallgemeinerte Exziton-Exziton-Wechselwirkung Δ_4 und ein Vertex höherer Ordnung Γ_6 auf. Die Bewegungsgleichung von Δ_4 ist in Anhang A2 gegeben. Aus A1 und A2 werden die Terme niedrigster Ordnung und höchster Symmetrie ausgewählt. Diese sind:

$$\begin{aligned}
 (115) \quad T_4(12,34) = & U(12,34) \\
 & + i \{ U(11',2'4) G(1',4') E(6',2') T_4(4'2,36') + (3 \longleftrightarrow 4) \} \\
 & + \frac{6}{2} U(12,-1'2') E(2',3') E(4',1') \Delta_4(3'4',34)
 \end{aligned}$$

und

$$(116) \quad \Delta_4(12,34) = -i U(1'2',-12) G(2',3') G(4',1') T_4(3'4',34)$$

Offensichtlich ist der nicht renormierte Beitrag von $\Gamma_4(12,34)$ gleich der ursprünglichen Elektron-Exziton-Wechselwirkung $U(12,34)$. Sollen bessere Approximationen für Γ_4 gefunden werden, ist darauf zu achten, daß jede Näherung von Γ_4 gewisse Symmetriebedingungen erfüllt [39-41], so daß die

damit berechneten Einteilchen-Greenschen Funktionen die Erhaltungssätze (der Energie, Impuls, Drehimpuls und Teilchenzahl) erfüllen. Gemäß der Arbeit von Baym [41] erfüllt eine Approximation der Elektron - Selbstenergie die Erhaltungssätze, wenn es ein Funktional Φ gibt, aus der die Selbstenergie Σ durch Variationsableitung gebildet werden kann.

$$(117) \quad \Sigma(1,2) = \left(\frac{\delta \Phi}{\delta G(2,1)} \right)_E$$

Diese Definition erfüllt automatisch die zusätzliche Bedingung für die effektive Teilchen-Loch-Wechselwirkung $\Theta(12,34)=\Theta(34,12)$, die definiert ist als:

$$(118) \quad \Theta(12,34) = \frac{\delta \bar{\Sigma}(1,2)}{\delta G(4,3)} = \frac{\delta^2 \Phi}{\delta G(4,3) \delta G(2,1)}$$

Für wechselwirkende Teilchenfelder mit Propagatoren G und E , muß ein Funktional $\Phi(G,E)$ existieren [38], aus dem die Selbstenergien abgeleitet werden können. Gleichung (114a) zeigt, daß in der Elektron-Selbstenergie der Elektron-Exziton-Streuvertex Γ_4 steht.

$$(119) \quad \Sigma = -\frac{1}{2} U G E E T_4$$

Wird die Selbstenergie in Form von Skeleton-Diagrammen (d.h. Diagrammen mit renormierten Propagatoren und nicht renormierten Streumatrixelementen U) dargestellt, zerfällt sie in eine Reihe,

$$(120) \quad \Sigma = \sum_{n=1} \Sigma^{(n)}$$

je nach Entwicklung von Γ_4 , wobei $\Sigma^{(n)}$ n Elektron-Linien enthält. Diese Reihe erzeugt eine zugehörige Reihe für das Funktional Φ .

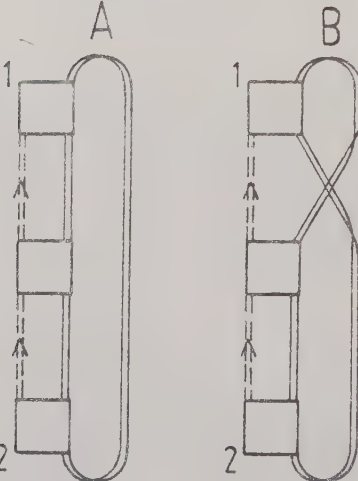
$$(121) \quad \Phi = \sum_{n=1} \Phi^{(n)} = \sum_{n=1} \frac{1}{n+1} \Sigma^{(n)} \mathcal{G}$$

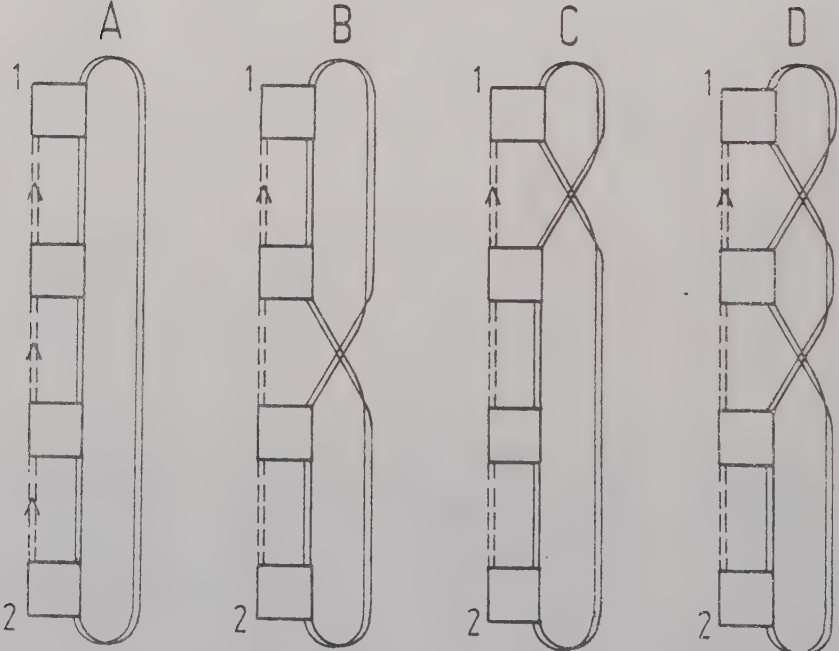
Dieses Funktional Φ dient als Entscheidungskriterium, welche der Beiträge aus (115) auf Terme führen, die die Gültigkeit der Erhaltungssätze garantieren. Werden die ersten drei Summanden von (115) bis zur zweiten Iteration betrachtet (Faktoren bleiben hier unberücksichtigt),

$$(122) \quad \begin{aligned} & \begin{array}{c} 1 \\ \square \\ 2 \end{array} \begin{array}{c} 4 \\ \square \\ 3 \end{array} = \begin{array}{c} 1 \\ \square \\ 2 \end{array} \begin{array}{c} 4 \\ \square \\ 3 \end{array} + \begin{array}{c} 1 \\ \square \\ 2 \end{array} \begin{array}{c} 4 \\ \square \\ 3 \end{array} + \begin{array}{c} 1 \\ \square \\ 2 \end{array} \begin{array}{c} 3 \\ \square \\ 4 \end{array} \\ & + \begin{array}{c} 1 \\ \square \\ 2 \end{array} \begin{array}{c} 4 \\ \square \\ 3 \end{array} + \begin{array}{c} 1 \\ \square \\ 2 \end{array} \begin{array}{c} 4 \\ \square \\ 3 \end{array} + \begin{array}{c} 1 \\ \square \\ 2 \end{array} \begin{array}{c} 3 \\ \square \\ 4 \end{array} + \begin{array}{c} 1 \\ \square \\ 2 \end{array} \begin{array}{c} 3 \\ \square \\ 4 \end{array} + \dots \end{aligned}$$

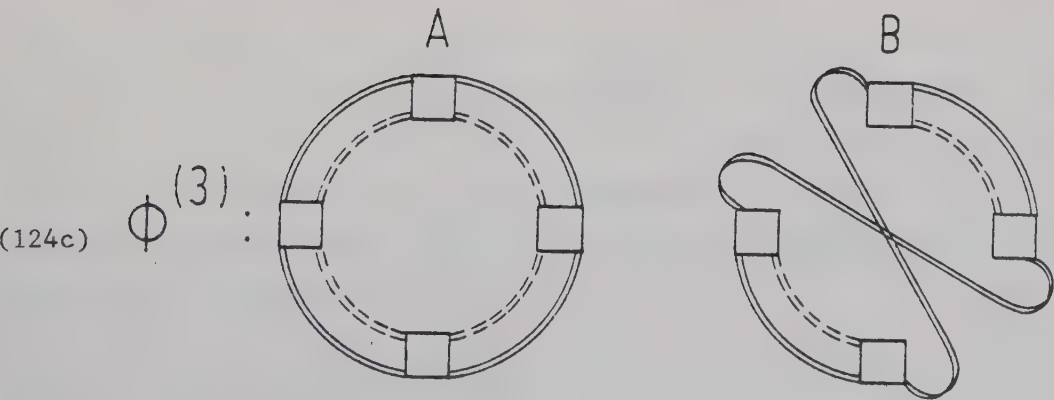
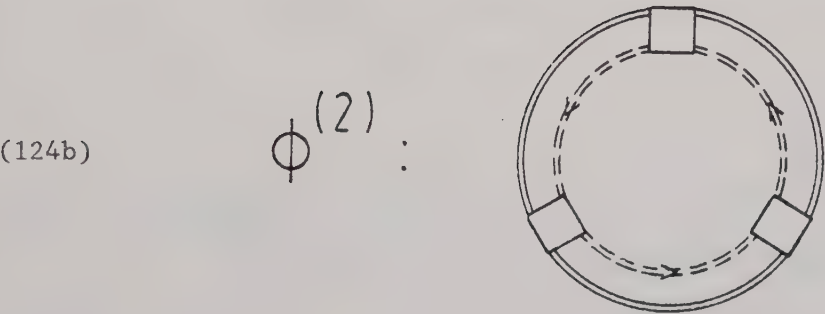
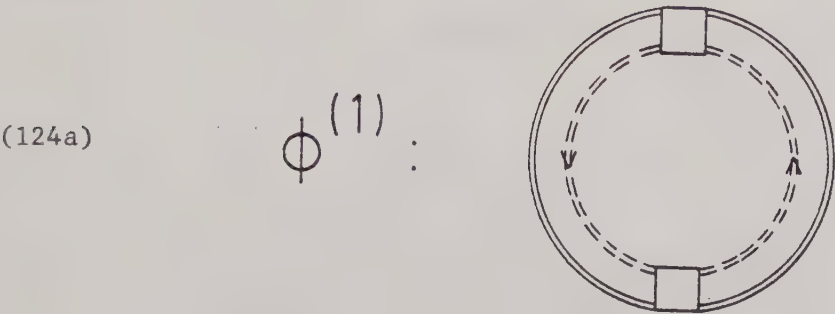
führt das auf Beiträge zur Selbstenergie bis in dritter Ordnung.

(123a) $\sum^{(1)} (1,2):$ 

(123b) $\sum^{(2)} (1,2):$ 

(123c) $\sum^{(3)} (1,2):$ 

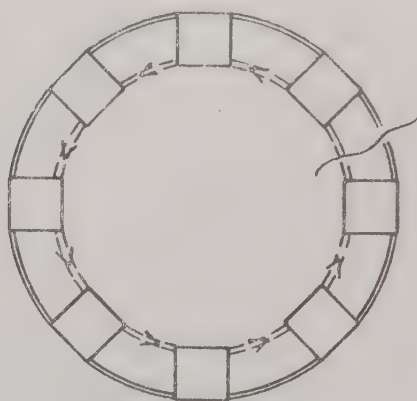
Die Selbstenergie zweiter Ordnung (123b) besteht aus zwei Beiträgen, die aber wegen $U(12,34) = U(12,43)$ äquivalent sind. Die Beiträge dritter Ordnung (123c) zerfallen in zwei nicht äquivalente Gruppen, wobei gezeigt werden kann, daß $A = C$ und $B = D$ ist. Die Reihe der Selbstenergie definiert die Reihe des Φ -Funktionals.



Wegen der zwei verschiedenen Selbstenergiebeiträge dritter Ordnung kommt es zu zwei verschiedenen Funktionalen (A,B). Jedoch sind für das Funktional B die Elektronen nicht äquivalent, so daß dieses Funktional nicht die Bedingung (117) erfüllt. Beiträge aus Γ_4 , die zu solchen Funktionalen führen, müssen ausgeschlossen werden. Eine brauchbare Entwicklung der Φ -Funktionals ist durch eine Summe von Ringdiagrammen gegeben, deren erste Summanden in (124 a+b+c) zu sehen sind. Der Beitrag n-ter Ordnung besteht aus einem Ring mit n Wechselwirkungen U.

(125)

$\Phi^{(n)} :$



Der zu diesem Φ -Funktional gehörende Vertex Γ_4 ist eine symmetrisierte Leiterapproximation und kann wie folgt geschrieben werden:.

(126)

$$\begin{matrix} 1 \\ 2 \end{matrix} \boxed{\Gamma_4}^4_3 = \begin{matrix} 1 \\ 2 \end{matrix} \boxed{\Gamma_4^L}^4_3 + \begin{matrix} 1 \\ 2 \end{matrix} \boxed{\Gamma_4^L}^3_4 - \begin{matrix} 1 \\ 2 \end{matrix} \boxed{}^4_3$$

(126a)

$$\begin{matrix} 1 \\ 2 \end{matrix} \boxed{\Gamma_4^L}^4_3 = \begin{matrix} 1 \\ 2 \end{matrix} \boxed{}^4_3 + \begin{matrix} 1 \\ 2 \end{matrix} \boxed{}^4_{\Gamma_4^L}_3$$

Für den ersten und vierten Summanden aus Gleichung (115), zusammen mit Gleichung (116), kann eine analoge Untersuchung durchgeführt werden. Zu dieser Approximation existiert auch ein Funktional Φ , dessen n-ter Ordnungsbeitrag als Blasendiagramm dargestellt werden kann.

(127) $\Phi^n :$

Der zu dieser Auswahl entsprechende verallgemeinerte Vertex Γ_4 ist:

(128)

$${}^1_2 \boxed{\Gamma_4^B} {}^4_3 = {}^1_2 \boxed{} {}^4_3 + {}^1_2 \boxed{} \bigcirc \boxed{} \bigcirc \boxed{\Gamma_4^B} {}^4_3$$

Schließlich kann ein Φ -Funktional durch Addition der Ergebnisse (125) und (127) gebildet werden, in dem dann sowohl Ring- als auch Blasenbeiträge enthalten sind. Die beschriebenen nichtstörungstheoretischen Approximationen (die symmetrisierte Leiter-Approximation (126), die Blasen - Approximation (128) und die Leiter-Blasen-Approximation) erfüllen alle die geforderten Erhaltungssätze.

5.1 DAS POLARITON

Um die Konsistenz des vorgegebenen Gleichungssystems (112-114) zu überprüfen, soll zunächst der exakt lösbare Anteil untersucht werden. Es ist die reine Exziton-Photon-Kopplung, die man für verschwindende Elektron-Exziton-Wechselwirkung U erhält. Vier Gleichungen bestimmen dieses System:

$$(129) \quad \mathcal{D}(1,2) = \mathcal{D}_0(1,2) + \mathcal{D}_0(1,1') \Pi^x(1',2') \mathcal{D}(2',2)$$

$$(129a) \quad \Pi^r(1,2) = \frac{\partial^2}{\partial t_1^2} \frac{B_1}{\omega_1^x} E_0(1,2) \frac{B_2}{\omega_2^x}$$

$$(130) \quad E(1,2) = E_0(1,2) + E_0(1,1') \Pi^x(1',2') E(2',2)$$

$$(130a) \quad \Pi^x(1,2) = \frac{\partial^2}{\partial t_1^2} \frac{B_1}{\omega_1^x} \mathcal{D}_0(1,2) \frac{B_2}{\omega_2^x}$$

Die Fourierentwicklung (60) der freien Propagatoren (102,103) ergibt.

$$(131) \quad \mathcal{D}_0(\vec{p}, z_\nu) = \frac{2\omega_p^x}{z_\nu^2 - (\omega_p^x)^2}$$

$$(132) \quad E_0(\vec{p}, z_\nu) = \frac{2\omega_p^x}{z_\nu^2 - (\omega_p^x)^2}$$

Diese freien Propagatoren legen schon die Selbstenergien (129a,130a) fest,

$$(133) \quad \Pi^{\sigma}(\vec{p}, z_{\nu}) = \frac{\omega_0^2}{2\omega_p^{\sigma}} \frac{z_{\nu}^2}{z_{\nu}^2 - (\omega_p^{\sigma})^2}$$

$$(134) \quad \Pi^{\chi}(\vec{p}, z_{\nu}) = \frac{\omega_0^2}{2\omega_p^{\chi}} \frac{z_{\nu}^2}{z_{\nu}^2 - (\omega_p^{\chi})^2}$$

so daß die Gleichungen (129,130) exakt gelöst werden können. Die resultierenden Greenschen Funktionen sind nach analytischer Fortsetzung:

$$(135) \quad D(\vec{p}, z) = \frac{2\omega_p^{\sigma}}{z^2 - (\omega_p^{\sigma})^2 - \frac{\omega_0^2 z^2}{z^2 - (\omega_p^{\chi})^2}}$$

$$(136) \quad E(\vec{p}, z) = \frac{2\omega_p^{\chi}}{z^2 - (\omega_p^{\chi})^2 - \frac{\omega_0^2 z^2}{z^2 - (\omega_p^{\sigma})^2}}$$

Die Pole einer renormierten Greenschen Funktion geben das Eigenwertspektrum der neuen Quasiteilchen an. Für beide Lösungen (135, 136) kommt es zu ein und derselben Eigenwertgleichung.

$$(137) \quad (z^2 - (\omega_p^{\sigma})^2)(z^2 - (\omega_p^{\chi})^2) - \omega_0^2 z^2 = 0$$

Sie ist identisch mit der Eigenwertgleichung des Polaritons, den Quasiteilchen, die Hopfield [31] für das System gekoppelter Photonen und Exzi-

tonen eingeführt hat. Lösen der Eigenwertgleichung (137) führt auf die Eigenmoden des gekoppelten Systems. Es ist:

$$Z_{1,2}^2 = \frac{1}{2} \left[(\omega_p^*)^2 + (\omega_p^x)^2 + \omega_0^2 \right] \pm \sqrt{\left(\frac{(\omega_p^*)^2 + (\omega_p^x)^2 + \omega_0^2}{2} \right)^2 - (\omega_p^*)^2 (\omega_p^x)^2}$$

Damit sind die neuen Eigenmoden:

$$(138a) \quad E_{1,3}(p) = \pm \sqrt{Z_1^2}$$

$$(138b) \quad E_{2,4}(p) = \pm \sqrt{Z_2^2}$$

$E_1(p)$ ist die Polaritondispersion des unteren Astes.

$E_2(p)$ ist die Polaritondispersion des oberen Astes.

Das Polaritonspektrum ist in Abb.3 für die Einteilchenfrequenzen

$$\omega_k^y = 10k,$$

$$\omega_k^x = 6 + 0.1k^2,$$

$$\omega_k^e = 6.5 + k^2,$$

$$\omega_k^h = 5 - 0.2k^2 \text{ und einer Plasmafrequenz von}$$

$$\omega_0 = 2 \text{ aufgetragen.}$$

Die Greenschen Funktionen (135,136) können durch die neuen Eigenmoden E_{1p} und E_{2p} dargestellt werden.

$$(139) \quad D(\vec{p}, z) = |C_{11} - C_{13}| \frac{2E_{1p}}{z^2 - (E_{1p})^2} + |C_{21} - C_{23}| \frac{2E_{2p}}{z^2 - (E_{2p})^2}$$

$$(140) \quad E(\vec{p}, z) = |C_{12} - C_{14}| \frac{2E_{1p}}{z^2 - (E_{1p})^2} + |C_{22} - C_{24}| \frac{2E_{2p}}{z^2 - (E_{2p})^2}$$

Dabei sind die auftretenden Faktoren

$$(141) \quad C_{11} - C_{13} = \frac{\omega_p^x}{E_{1p}} \frac{(1 - (\frac{E_{1p}}{\omega_p^x})^2)^2}{[(1 - (\frac{E_{1p}}{\omega_p^x})^2)^2 + (\frac{\omega_0}{\omega_p^x})^2]}$$

$$(142) \quad C_{21} - C_{23} = \frac{\omega_p^x}{E_{2p}} \frac{(1 - (\frac{E_{2p}}{\omega_p^x})^2)^2}{[(1 - (\frac{E_{2p}}{\omega_p^x})^2)^2 + (\frac{\omega_0}{\omega_p^x})^2]}$$

$$(143) \quad C_{12} - C_{14} = \frac{(\frac{\omega_0}{\omega_p^x})^2 \frac{E_{1p}}{\omega_p^x}}{[(1 - (\frac{E_{1p}}{\omega_p^x})^2)^2 + (\frac{\omega_0}{\omega_p^x})^2]}$$

$$(144) \quad C_{22} - C_{24} = \frac{(\frac{\omega_0}{\omega_p^x})^2 \frac{E_{2p}}{\omega_p^x}}{[(1 - (\frac{E_{2p}}{\omega_p^x})^2)^2 + (\frac{\omega_0}{\omega_p^x})^2]}$$

Die Gleichungen (139) und (140) verdeutlichen, daß die renormierten Photonen und Exzitonen als neue Quasiteilchen (Polaritonen) mit der Dispersion (138) , aufgefaßt werden können.

Gemäß Hopfield wird das System gekoppelte Photonen und Exzitonen durch eine kanonischen Transformation gelöst, bei der Hamiltonoperator (51 ohne Elektronen und $U = 0$) auf Diagonalform gebracht wird.

$$(145) \quad H = \sum_{jk} E_{jk} \alpha_{jk}^+ \alpha_{jk}$$

E_{jk} stellt das Eigenwertspektrum (138) des j -ten Polaritonastes und α_{jk} der Vernichtungsoperator der Polaritonen im j -ten Ast dar. Die kanonische Transformation definiert einen Zusammenhang zwischen den Photon-, Exzitonoperatoren (φ_k^a, φ_k^x) und den Polaritonoperatoren ($\alpha_{ik}, \alpha_{jk}^+$), der explizit in [31,10] gegeben ist. Wird die Photon- und Exziton-Greensche Funktion (52a+b) auf Polaritonoperatoren transformiert, treten Koeffizienten (Hopfieldkoeffizienten) auf, die mit den Faktoren (141-144) identisch sind. Lösen der Bewegungsgleichung dieser Polariton-Greenschen Funktionen

$$(146) \quad \mathcal{P}_i(\vec{p}, t) = -i (\langle T \alpha_{ip}(t) \alpha_{ip}^+ \rangle + \langle T \alpha_{i-p}^+(t) \alpha_{i-p} \rangle)$$

mit dem Hamiltonoperator (145) führt exakt auf die Lösungen (139,140).

Das dielektrische Verhalten der gekoppelten Exzitonen und Photonen ist durch die Photon-Selbstenergie (133) festgelegt. Die aus dieser Näherung resultierende dielektrische Funktion ist:

$$(147) \quad \epsilon(\vec{p}, \omega) = 1 - \frac{\omega_0^2}{(\omega + i\eta)^2 - (\omega_p^x)^2}$$

und stellt die Resonanz des freien Exzitons dar. Auch dies ist im Einklang mit Hopfield.

Die dielektrische Funktion (147) kann benutzt werden, um die Plasmafrequenz des nichtangeregten Kristalls ω_0 durch experimentelle Daten zu bestimmen. ω_p^x ist die Einteilchenenergie des transversalen Exzitons, das für die folgende Ableitung ω_{pT}^x bezeichnet wird. Dieses liegt für $p=0$ um den Betrag Δ_{LT} tiefer, als das optisch inaktive longitudinale Exziton ω_{pL}^x . Δ_{LT} wird die Longitudinal-Transversal-Aufspaltung genannt. Sie ist eine experimentell gut zugängliche Größe. Die Lyddane-Sachs-Teller-Beziehung

$$(148) \quad \left(\frac{\omega_{oT}^x}{\omega_{oL}^x} \right) = \frac{\epsilon_\infty}{\epsilon_0}$$

schaftt einen Zusammenhang der Einteilchenenergien des transversalen und longitudinalen Exzitons mit den asymptotischen Grenzfällen der dielektrischen Funktion. Die Berechnung von ϵ_∞ und ϵ_0 aus (147) ergibt:

$$\begin{aligned} \epsilon_\infty &= 1 \\ \epsilon_0 &= 1 + \left(\frac{\omega_o}{\omega_{oT}^x} \right)^2 \end{aligned}$$

Wird dies in (148) eingesetzt resultiert,

$$(149) \quad \omega_o^2 = (\omega_{oL}^x)^2 - (\omega_{oT}^x)^2$$

und mit $\omega_{0L}^x = \omega_{0T}^x + \Delta_{LT}$ ist ersichtlich, daß ω_0 durch ω_{0T}^x und Δ_{LT} bestimmt ist.

Wirken nichtresonante Übergänge in einen betrachteten Spektralbereich, ist dies durch eine Dielektrizitätskonstante zu berücksichtigen. Dies führt auf eine Modifikation der dielektrischen Funktion (147). Die durch die nichtresonanten Übergänge modifizierten Eigenmoden des elektromagnetischen Feldes sind aus der Gleichung

$$(150) \quad \omega^2 - \frac{1}{\epsilon_\infty} \left((\omega_p^x)^2 + 2 \omega_p^x \Pi(\vec{p}, \omega)^R \right) = 0$$

zu berechnen. Wird die Photon-Selbstenergie (133) in (150) eingesetzt, erhält man:

$$(151) \quad \frac{1}{\epsilon_\infty} \left(\frac{\omega_p^x}{\omega} \right)^2 = 1 - \frac{\omega_0^2 / \epsilon_\infty}{\omega^2 - (\omega_p^x)^2}$$

Berücksichtigung der nichtresonanten Beiträge durch eine hochfrequente Dielektrizitätskonstante ϵ_∞ , führt auf die dielektrische Funktion,

$$(152) \quad \epsilon(\vec{p}, \omega) = \epsilon_\infty - \frac{\omega_0^2}{\omega^2 - (\omega_p^x)^2}$$

die anstelle von (147) zu verwenden ist.

5.2 ELEKTRONASSISTIERTER EXZITONREKOMBINATION

Die einfachste nichttriviale Näherung, um den Einfluß der Exziton-Elektron-Streuung auf die optischen Spektren zu untersuchen, liegt vor, wenn der Elektron-Exziton-Vertex Γ_4 durch das Wechselwirkungsmatrixelement U ersetzt wird. Mit dieser Approximation wird die Polarisationsfunktion durch die Gleichungen (112-114) berechnet. Um das Gleichungssystem weiter zu vereinfachen, wird die Elektron-Selbstenergie vernachlässigt. Diese Renormierung führt hauptsächlich zu einer starren Bandverschiebung, die sich weitgehend aufhebt, da im resultierenden Ausdruck der Polarisation nur Differenzen der Elektronenergien stehen. In der Exziton-Selbstenergie wird nur die führende Polariton Korrektur berücksichtigt, so daß die Exziton-Greensche Funktion durch (136) gegeben ist. Letztendlich wird noch der Hartree-Beitrag in der Photon - Selbstenergie vernachlässigt. Die wegen dieses Beitrages auftretende Verschiebung wird durch eine vollständigere Theorie [14,15] kompensiert.

Der approximative Satz von Gleichungen ist:

Das Photon

$$(153) \quad D(1,2) = D_0(1,2) + D_0(1,1') \Pi^r(1',2') D(2',2)$$

mit der Photon-Selbstenergie

$$(153a) \quad \Pi^r(1,2) = i \frac{\partial}{\partial t_1} \frac{B_1}{\omega_1^*} \Pi^r(1,2)$$

wobei

$$(153b) \quad \tilde{\Pi}^{\sigma}(1,2) = i \frac{\partial}{\partial t_2} E_0(1,2) \frac{B_2}{\omega_2^{\sigma}} + E_0(1,1') \tilde{\Pi}^{e-\sigma}(1',2') \tilde{\Pi}^{\sigma}(2',2)$$

und der Selbstenergie der Elektron-Exziton-Streuung

$$(153c) \quad \tilde{\Pi}^{e-\sigma}(1,2) = U(1'2',3'-1) G_0(5',1') G_0(2',4') E(3',6') U(4'5',2-6')$$

Das Exziton

$$(154) \quad E(1,2) = E_0(1,2) + E_0(1,1') \tilde{\Pi}^{x-\sigma}(1',2') E(2',2)$$

mit der Exziton-Selbstenergie

$$(154a) \quad \tilde{\Pi}^{x-\sigma}(1,2) = \frac{\partial^2}{\partial t_1^2} \frac{B_1}{\omega_1^{\sigma}} D_0(1,2) \frac{B_2}{\omega_2^{\sigma}}$$

Es sind $E_0(1,2)$ und $G_0(1,2)$ die freien Greenschen Funktionen der Exzitonen und Elektronen. Im Gegensatz zu $E_0(1,2)$ enthält $E(1,2)$ die Polaritonrenormierung $\tilde{\Pi}^{x-\sigma}(1,2)$ (136). Es wird betont, daß die Polarisationsfunktion (153a) trotz der Photonkorrektur eine irreduzible Photon-Selbstenergie ist.

Zur Lösung des Gleichungssystems (153) werden alle Funktionen in eine Fourierreihe entwickelt. Aus (153a) wird

$$(155) \quad \tilde{\Pi}^{\sigma}(\vec{p}, z_{\nu}) = z_{\nu} \frac{B_p}{\omega_p^{\sigma}} \tilde{\Pi}^{\sigma}(\vec{p}, z_{\nu})$$

und aus (153b) folgt:

$$(156) \quad \tilde{\Pi}^x(\vec{p}, z_\nu) = -z_\nu \frac{B_p}{\omega_p^x} \frac{2\omega_p^x}{z_\nu^2 - (\omega_p^x)^2 - 2\omega_p^x \Pi^{e-x}(\vec{p}, z_\nu)}$$

Einsetzen von (156) in (155) und analytische Fortsetzung ergibt den folgenden Ausdruck für die Photon-Selbstenergie:

$$(157) \quad \Pi^x(\vec{p}, z) = \frac{z^2}{2\omega_p^x} \frac{\omega_o^2}{z^2 - (\omega_p^x)^2 - 2\omega_p^x \Pi^{e-x}(\vec{p}, z)}$$

Als einzig noch unbekannte Größe tritt hier die Selbstenergie der Elektron-Exziton-Streuung (153c) auf. Einsetzen der Impulse und Zeiten ergibt:

$$(158) \quad \Pi^{e-x}(\vec{p}, t_1 - t_2) = \sum_{q_1, q_2} 2U^2 \delta_{q_1, -q_2, q_3, -p} g_o(\vec{q}_1, t_2 - t_1) g_o(\vec{q}_2, t_1 - t_2) E(\vec{q}_3, t_1 - t_2)$$

Dabei kommt es durch den Spin der Elektronen zu einem Faktor 2. Durch Fourierentwicklung der Greenschen Funktionen in (158), treten in den Fourierkoeffizienten der Elektron-Exziton-Selbstenergie zwei Frequenzsummen auf.

$$(159) \quad \Pi^{e-x}(\vec{p}, z_\nu) = \frac{1}{(-i\beta)^2} \sum_{kq\lambda\mu} 2U^2 E(\vec{k}, z_\lambda) g_o(\vec{q}, z_\mu) g_o(\vec{k} + \vec{q} - \vec{p}, z_\lambda + z_\mu - z_\nu)$$

Es sind z_μ Fermion-Frequenzen und

und z_ν, z_λ Boson-Frequenzen

Werden die Greenschen Funktionen in (159) durch Spektraldichten (71) ausgedrückt,

$$(160) \quad \Pi(\vec{p}, z_\nu) = \frac{1}{(-i\beta)^2} \sum_{\vec{k}, \lambda, \mu} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{d\omega''}{2\pi} 2u^2 \frac{R^x(\vec{k}, \omega)}{z_\lambda - \omega} \frac{R_o^e(\vec{q}, \omega')}{z_\mu - \omega'} \frac{R_o^e(\vec{k} + \vec{q} - \vec{p}, \omega'')}{z_\lambda + z_\mu - z_\nu - \omega''}$$

können die zwei Frequenzsummen ausgewertet werden. Dabei wird die Frequenzsumme auf ein Kurvenintegral in der komplexen Ebene abgebildet. Es gilt [37]

$$(161) \quad \frac{1}{-i\beta} \sum_\nu h(z_\nu) = \mp \oint_{C'} \frac{dz}{2\pi} f(z) h(z)$$

- für Boson-Frequenzen

+ für Fermi-Frequenzen

$f(z) = 1/(e^{\beta z} \mp 1)$ sind Bose- und Fermiverteilungsfunktionen, deren Pole gerade an den Stellen z_ν vorliegen.

$n(z)$ ist eine beliebige Funktion mit singulären Polen, die nicht mit denen von $f(z)$ zusammenfallen dürfen.

C' sind geschlossene Kurven um die singulären Pole von $h(z)$, die im mathematisch positiven Sinn durchlaufen werden.

Mit (161) wird aus den Frequenzsummen in (160):

$$(162) \quad \frac{1}{(-i\beta)^2} \sum_{\lambda\mu} \frac{1}{z_\lambda - \omega} \frac{1}{z_\mu - \omega'} \frac{1}{z_\lambda + z_\mu - z_\nu - \omega''}$$

$$= \frac{(1 + g(\omega)) f(\omega'') - (f(\omega'') + g(\omega)) f(\omega')}{z_\nu + \omega'' - \omega - \omega'}$$

$g(\omega)$ sind Bosonverteilungsfunktionen für Exzitonen

$f(\omega)$ sind Fermiverteilungsfunktionen für Elektronen

Damit nimmt die Selbstenergie der Elektron-Exziton-Wechselwirkung die Form an:

$$(163) \quad \Pi^{e-x}(\vec{p}, z_\nu) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} \frac{d\mu}{2\pi} \frac{d\mu'}{2\pi} 2 U^2 R(\vec{k}, \lambda) R_0^e(\vec{q}, \mu) R_0^e(\vec{k} + \vec{q} - \vec{p}, \mu')$$

$$* \frac{(1 + g(\lambda)) f(\mu') - (f(\mu') + g(\lambda)) f(\mu)}{z_\nu + \mu' - \lambda - \mu}$$

Die Spektraldichte des Exzitons in (163) kann aus der Greenschen Funktion (140) berechnet werden. Es ist die Greensche Funktion des Exziton - Polaritons, das durch elektronassistierte Absorption im Kristall erzeugt wird. Im relevanten Impulsintervall $k \neq 0$, unter der Voraussetzung, daß nur der untere Polaritonast betrachtet wird, sind die Polaritonkorrekturen ziemlich klein und werden vernachlässigt. Es ist:

$$E_{1k} \approx \omega_k^x \quad |C_{12} - C_{14}|^2 \approx 1$$

und zur Berechnung der Spektraldichte des Exzitons wird

$$(164) \quad E(\vec{k}, z) = \frac{2\omega_k^x}{z^2 - (\omega_k^x)^2}$$

genommen. Die Spektraldichte für Exziton und Elektron ist:

$$(165a) \quad H^x(\vec{k}, \lambda) = 2\pi (\delta(\lambda - \omega_k^x) - \delta(\lambda + \omega_k^x))$$

$$(165b) \quad H_o^e(\vec{q}, \mu) = 2\pi \delta(\mu - \omega_q^e)$$

Einsetzen der Spektraldichten in (163), und Verwendung von thermischen Quasigleichgewichtsverteilungsfunktionen für Elektronen und Exzitonen, führt auf die Selbstenergie der Elektron-Exziton-Streuung. Die analytische Fortsetzung dieser Selbstenergie ist:

$$(166) \quad \Pi^{e-x}(\vec{p}, z) = \Pi_1^{e-x}(\vec{p}, z) + \Pi_1^{e-x}(-\vec{p}, -z)$$

dabei ist

$$(166a) \quad \Pi_1^{e-x}(\vec{p}, z) = \sum_{kq} 2u^2 \frac{[(1 + g_k) f_{k+q-p} - (f_{k+q-p} + g_k) f_q]}{z - (\omega_k^x + \omega_q^e - \omega_{k+q-p}^e)}$$

Wir interessieren uns in (157) für die retardierte Photon-Selbstenergie, in der die retardierte Selbstenergie der Elektron-Exziton-Streuung steht. Aus der analytischen Fortsetzung (166) kann die retardierte Selbstenergie $\Pi^{e-x}(p, \omega + i\eta)$ berechnet werden. Die Dirac-Identität (77) ermöglicht die Berechnung der Spektraldichte der Selbstenergie (166)

$$(167) \quad T^{e-x}(\vec{p}, \omega) = i \left[\Pi^{e-x}(\vec{p}, z)_{z=\omega+i\eta} - \Pi^{e-x}(\vec{p}, z)_{z=\omega-i\eta} \right]$$

Die Spektraldichte ist

$$(168) \quad T^{e-x}(\vec{p}, \omega) = T_1^{e-x}(\vec{p}, \omega) - T_1^{e-x}(-\vec{p}, -\omega)$$

mit

$$(168a) \quad T_1^{e-x}(\vec{p}, \omega) = 4\pi \sum_{kq} v^2 \delta(\omega_k^x + \omega_q^e - \omega_{k+q-p}^e - \omega) [(1+g_k) f_{k+q-p} - (f_{k+q-p} + g_k) f_q]$$

Der Realteil der Selbstenergie kann aus der Spektraldichte $\Gamma^{x-e}(p, \omega)$ berechnet werden.

$$(169) \quad \text{Re } \Pi^{e-x}(\vec{p}, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{T_1^{e-x}(\vec{p}, \omega)}{\omega - \omega'}$$

Insgesamt bekommt man für die retardierte Selbstenergie der Elektron - Exziton - Streuung

$$(170) \quad \Pi^{e-x}(\vec{p}, \omega)^R = \text{Re } \Pi^{e-x}(\vec{p}, \omega) - \frac{i}{2} T_1^{e-x}(\vec{p}, \omega)$$

Durch Einsetzen dieser Selbstenergie in die Polarisationsfunktion (157), kann die dielektrische Funktion (17) berechnet werden. Im langwelligen Grenzfall ist das Ergebnis,

$$(171) \quad \epsilon(\omega) = \epsilon_\infty - \frac{\omega_0^2}{\omega^2 - (\Omega_0^x)^2 + i\omega_0^x \Gamma^{e-x}(\omega)}$$

mit

$$(171a) \quad \Omega_0^x = [(\omega_0^x)^2 + 2\omega_0^x \operatorname{Re} \Pi(\omega)]^{1/2}$$

wobei alle nichtresonanten Übergänge durch eine hochfrequente dielektrische Konstante ϵ_∞ berücksichtigt werden.

Zur numerischen Berechnung der Spektren wird angenommen, daß zwischen Exzitonen und den freien Ladungsträgern thermisches Gleichgewicht herrscht. Dann gilt:

$$(172) \quad \mu_x = \mu_e + \mu_h$$

wobei μ_x , μ_e und μ_h das chemische Potential der Exzitonen, Elektronen und Löcher ist. Durch diese Bedingung und unter Berücksichtigung das $n_e = n_h$ ist, kann die Dichte der Elektronen aus der Exzitondichte berechnet werden:

$$(173) \quad n_e = 2 \sqrt{n_x} \left(\frac{m_e m_h}{M_x 2\pi \beta \hbar^2} \right)^{3/2} e^{-\beta/2 E_b^x}$$

Es ist n_x , n_e und n_h die Dichte der Exzitonen, Elektronen und Löcher. Die Verteilungsfunktionen in (166) werden durch Boltzmannverteilungen approximiert.

$$(174a) \quad g_k = n_x (2\pi \beta \hbar^2 / M_x)^{3/2} e^{-\beta \frac{\hbar^2 k^2}{2M_x}}$$

$$(174b) \quad f_k = \frac{n^e}{2} (2\pi\beta\hbar^2/m_e)^{3/2} e^{-\beta \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}}$$

Als Vertreter der II-VI Verbindungen wird CdS gewählt, das durch die folgenden Materialparameter charakterisiert ist.

m_e/m_0	m_h/m_0	M_x/m_0	ω_0 [meV]	E_b^x [meV]	ω_0^x [eV]	ϵ_∞
0.2	1.35	1.61	101	29	2.552	8

m_0 ist die freie Elektronmasse.

Das Elektron-Exziton-Martixelement U wird durch

$$(175) \quad U = 24\pi \frac{a_0^3}{V} E_b^x e^{-(a_0 k)^2}$$

ersetzt, wobei der Exponentialfaktor phänomenologisch hinzugefügt wird [1]. Dieser berücksichtigt, daß U für große Impulsüberträge, wegen der räumlichen Ausdehnung der Exzitonwellenfunktionen, verschwindet.

5.3 EXPERIMENTELLE MESSMETHODEN

Bevor die Spektren vorgestellt und mit experimentellen Resultaten verglichen werden, soll zunächst auf zwei Meßmethoden eingegangen werden, die

sich zur Bestimmung optischer Verstärkung durchgesetzt haben. Es ist die Strichlängenmethode [21,52] und die Zweistrahlmethode [53]

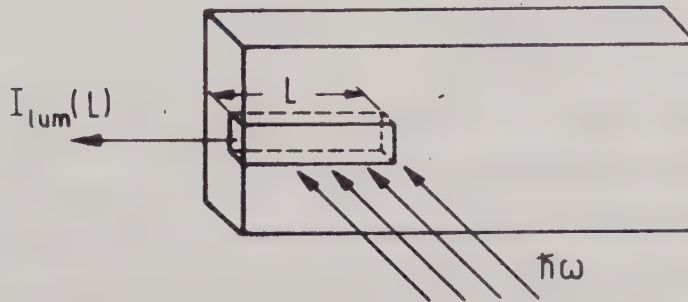


Abbildung 5. Anregung bei der Strichlängenmethode.

Bei der Strichlängenmethode (siehe Abb.5) wird ein Kristall in einem definierten Bereich angeregt. Parallel zur Anregungslänge L wird die Lumineszenz $I_{lum}(L)$ gemessen. Eine zweite Messung der Lumineszenz bei verdoppelter Anregungslänge, ermöglicht eine einfache Berechnung der optischen Verstärkungsfunktion $g(\omega)$. Es gilt:

$$(176) \quad g(\omega) = \frac{1}{L} \ln \left[\frac{I_{lum}(2L, \omega)}{I_{lum}(L, \omega)} - 1 \right]$$

Diese Gleichung ist nur gültig, wenn keine Sättigungseffekte auftreten. Dazu muß die Bedingung $g \cdot L < 5$ erfüllt sein. Mit zunehmender optischer Verstärkung muß deshalb die Anregungslänge gekürzt werden. Da Anregungslängen unter $50 \mu\text{m}$ experimentell schwer herzustellen sind, ist diese Methode auf Verstärkungen von $g < 10^3 \text{ cm}^{-1}$ beschränkt.

Im Zweistrahlexperiment (siehe Abb.6) wird der Lichtstrahl eines N_2 -Lasers in zwei Anteile zerlegt. Der eine Teilstrahl (gestrichelte Linie) versetzt den Kristall in Hochanregung. Der andere pumpt einen breitbandigen Farbstoff-Laser, dessen Emissionslicht als Probestrahl (durchgezogene Linie) dient. Beide Lichtstrahlen werden auf eine Lochblende von $70\text{ }\mu\text{m}$ Durchmesser fokussiert. Durch die Lochblende ist gewährleistet, daß beide Lichtstrahlen auf den gleichen Raumbereich des Kristalls abgebildet werden. Zeitliche Koinzidenz des Lichts ist wegen der gleichen optischen Weglängen garantiert. Die Pulsdauer des N_2 -Lasers (10nsec) ist fast doppelt so lang, wie die des Farbstoff-Lasers (6nsec). So findet die Messung im Bereich höchster Anregungsintensität statt. Aus der Messung reflektierter - und transmittierter Intensitäten, kann das Spektrum optischer Verstärkung gemäß der Gleichung

$$(177) \quad g(\omega) = -\frac{1}{d} \ln \left[I_T \left\{ I_T^o \left(1 - \frac{I_R}{I_R^o} \right) \right\}^{-1} \right] + \frac{1}{\delta} \ln \frac{I_T^*}{I_T} - \frac{1}{d} \ln F$$

berechnet werden. Dabei ist:

- $I_R^o(\omega)$ ist die reflektierte Intensität des Probestrahles:
- $I_R(\omega)$ an einem 95% Aluminiumspiegel, am nichtangeregten Kristall.
- $I_T^o(\omega)$ ist die transmittierte Intensität des Probestrah-
- $I_T(\omega)$ les: durch ein Loch in der Kristallhalterung, des
- $I_T^*(\omega)$ nichtangeregten Kristalles, des angeregten Kristalles.
- d ist die Kristalldicke.
- δ ist die Anregungstiefe.
- F ist eine Korrektur die Vielfachreflexionen berücksichtigt.

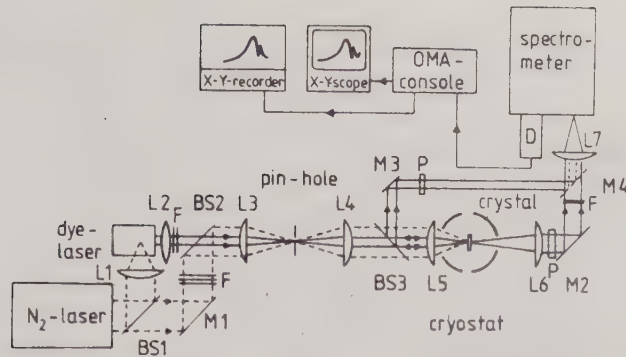


Abbildung 6. Aufbau des Zweistrahlexperimentes

(BS=Strahlteiler, andere Symbole wie in [53])

Besteht die Hochanregung nur aus einer dünnen Oberflächenschicht δ , können mit dieser Methode Verstärkungen $g(\omega) > 10^3 \text{ cm}^{-1}$ gemessen werden.

5.4 VERGLEICH DER SPEKTREN

Ein typisches Spektrum der Absorption $\alpha(\omega)$ und des Brechungsindex $n(\omega)$ ist für $T = 77\text{K}$ und einer Exzitondichte von $n_x = 3 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ in Abb.7 gezeichnet. Neben der starken Absorption des Exzitons, kommt es zur optischen Verstärkung unterhalb der Exzitonresonanz, wie es ursprünglich von Benoit a la Guillaume et al [17] diskutiert wurde. Typisch für das Spektrum der optischen Verstärkung, bedingt durch die Elektron - Exziton - Streuung, ist das langsame Auslaufen des Spektrums zu tiefen Frequenzen hin und der steile Übergang von Verstärkung zu Absorption. Experimentelle Spektren insbesondere die neueren Messungen von Bohnert und Klingshirn

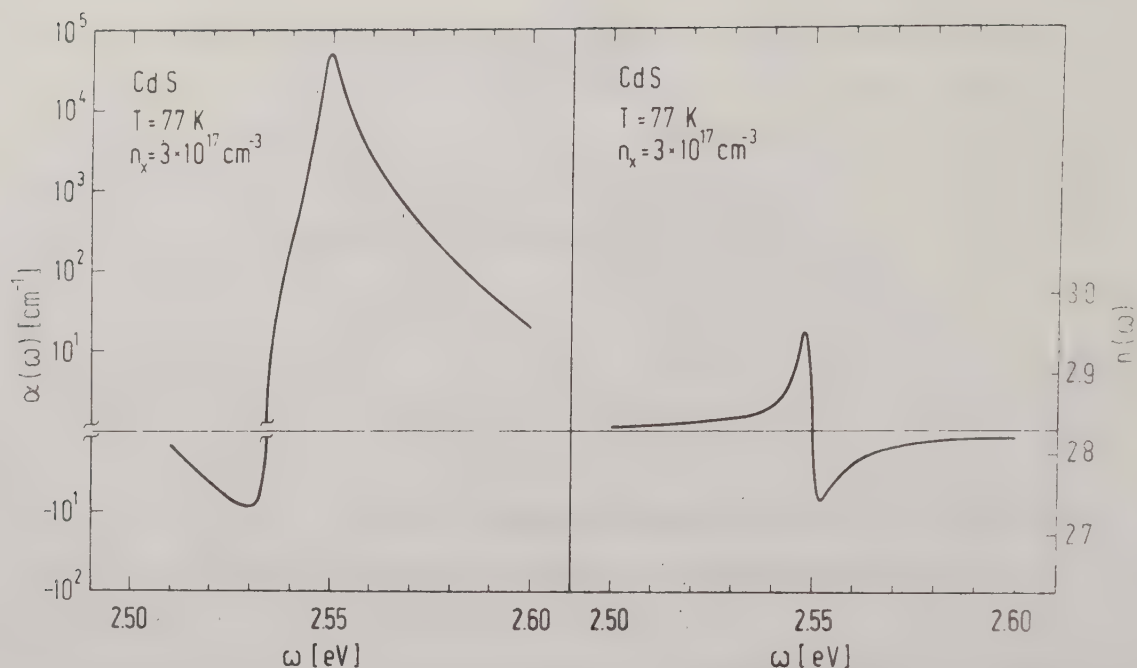


Abbildung 7. Absorptions- und Dispersionsspektrum von CdS

für $T=77\text{K}$ und einer Exzitondichte $n_x=3 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$

[42,43], sowie von Hvam [23] zeigen im mittleren Dichte- und Temperaturbereich dieses charakteristische Verhalten.

In Abb.8 sind Spektren bei fester Temperatur $T=77\text{K}$ und verschiedenen Dichten $n_x=(2 \cdot 10^{17}, 5 \cdot 10^{17}, 9 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3})$ berechnet. Mit zunehmender Dichte wächst die optische Verstärkung, was durch die zunehmende Anzahl der Streupartner zu verstehen ist. Mikroskopisch stellt der Absorptionskoeffizient die Differenz von Absorptions- und Emissionsrate dar, so daß bei zunehmender Emissionsrate die Absorptionsmaxima fallen. Der Schnittpunkt beim Übergang von Verstärkung zu Absorption wandert mit zunehmender Dichte zu höheren Energien. Dieser Schnittpunkt ist ein Maß für das chemische Potential $\mu_x = \mu_e + \mu_h$ des Systems, welches mit zunehmender Dichte

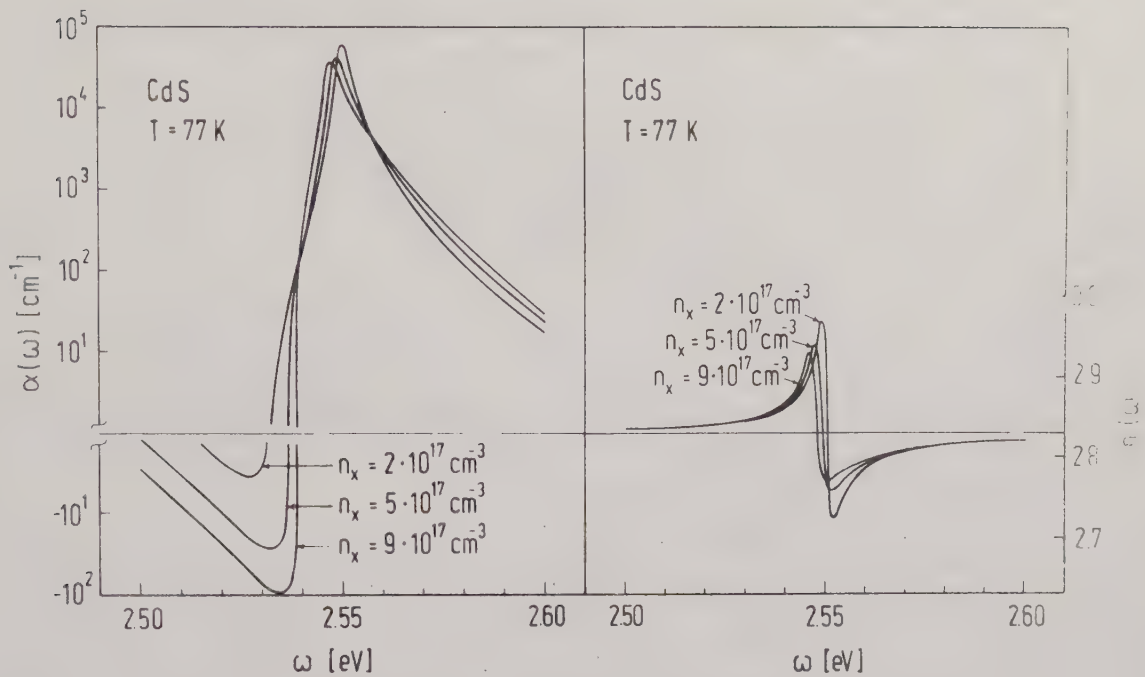


Abbildung 8. Absorptions- und Dispersionsspektrum von CdS
für verschiedene Dichten

der freien Ladungsträger wächst. Die Maxima der optischen Verstärkung liegen zwischen 3.5 und 95.4 cm^{-1} , und stimmen mit der erwarteten Größenordnung von etwa 100 cm^{-1} [17] für den Elektron-Exziton-Streuprozess überein.

Auch für exzitonische Systeme ist eine Dichteabhängigkeit des Brechungsindex festzustellen. Mit zunehmender Exzitondichte werden die Dispersionsextrema kleiner und verschieben sich mit der Exzitonresonanz.

Der Verlauf der Spektren zu verschiedenen Temperaturen $T = (85\text{K}, 105\text{K}, 130\text{K})$ und einer Exzitondichte von $n_x = 5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ist in Abb.9 dargestellt. Ab $T = 77\text{K}$ wird ein thermisches Absenken der Lückenenergie

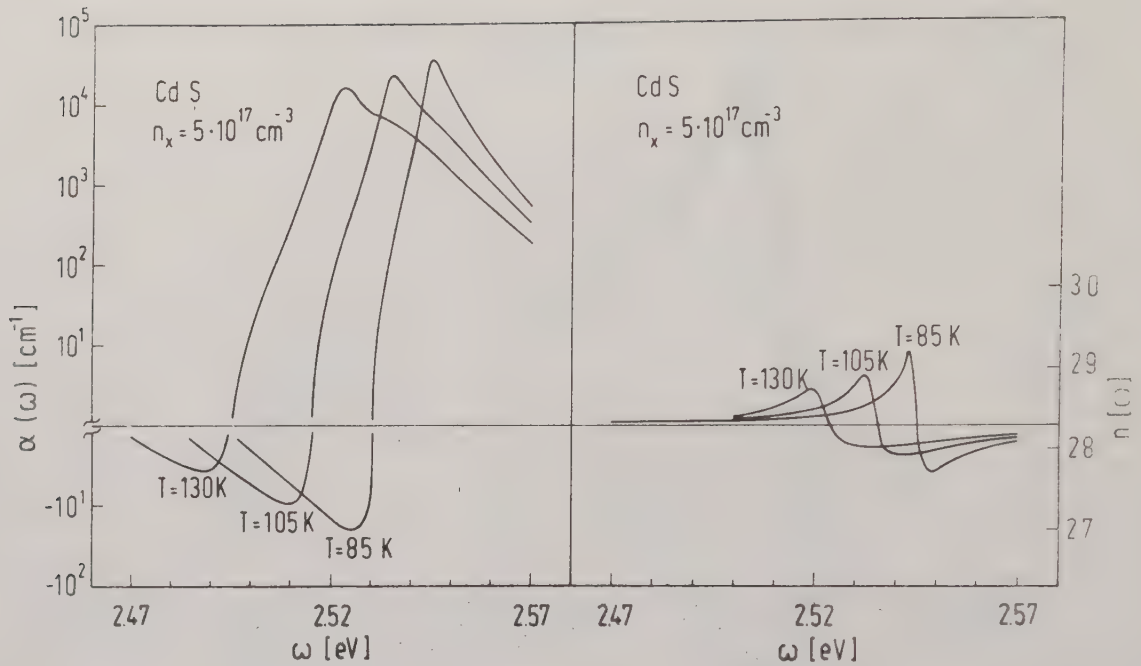


Abbildung 9. Absorptions- und Dispersionsspektrum von CdS
für verschiedene Temperaturen

von 0.4 meV K^{-1} berücksichtigt. Mit zunehmender Temperatur werden die Extrema im Bereich der Verstärkung und der Absorption breiter und flacher, was durch die Temperaturverbreiterung der Boltzmann Verteilungen (174) verursacht wird. Die Untersuchung der Temperaturabhängigkeit des chemischen Potentials μ_x zeigt, daß sich der Übergang von Verstärkung zu Absorption beachtlich zu tieferen Energien verschiebt.

In Abb.10 sind eine Reihe von Spektren der optischen Verstärkung aufgetragen, die zu Temperaturen $T = (85\text{K}, 105\text{K}, 130\text{K}, 155\text{K}, 180\text{K})$ und einer Exzitationsdichte von $n_x = 5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ gehören. Die fünf Spektren liegen auf einer Geraden, die in Abb.11 gezeichnet ist.

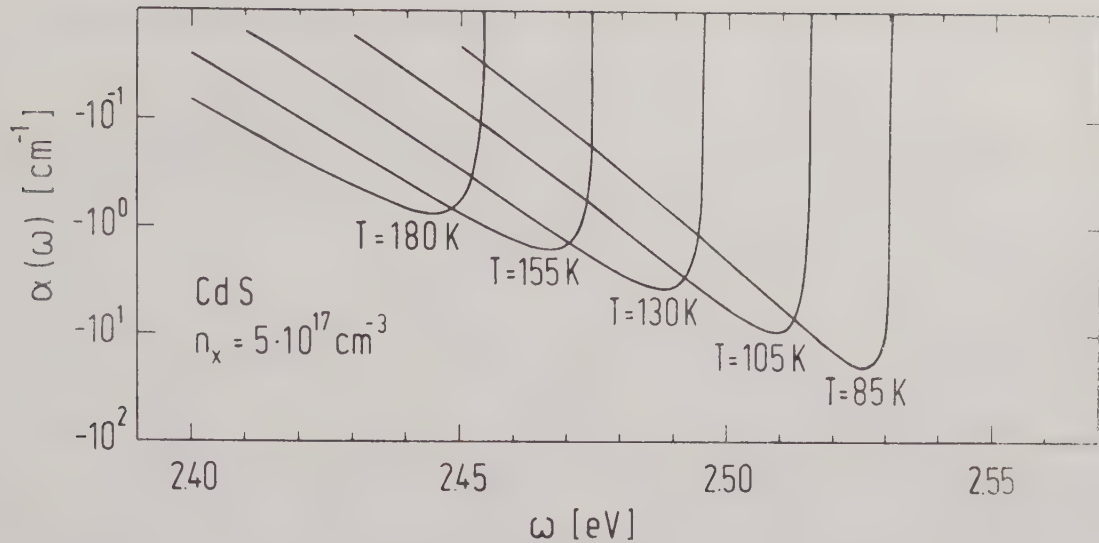


Abbildung 10. Spektren der optischen Verstärkung von CdS für verschiedene Temperaturen

Zum Vergleich sind einige Maxima experimenteller Spektren eingefügt.

a) Durch Kreise sind Messungen von Hvam [23] ($T = 120\text{K}, 180\text{K}$) eingetragen. Die optische Verstärkung wird dort durch die Strichlängenmethode [21,52] (siehe Abb.5) ermittelt. Die Anregung erfolgt durch Ein - Photonen - Absorption, und es wird eine Anregungsintensität von $1\text{-}10\text{MWcm}^{-2}$ verwendet. Beide Maxima liegen einige meV unterhalb der hier berechneten Geraden. Vermutlich ist die Strichlängenmethode Ursache für die zu tieferen Energien verschobenen Verstärkungsmaxima. Bei diesen hohen Anregungsintensitäten kommt es schon für sehr kleine Längen zu Sättigungseffekten. Dadurch hängen die, mit dieser Methode gemessenen Spektren, etwas von der Anregungslänge ab [43], und es tritt eine Rotverschiebung der Verstärkungsmaxima auf.

b) Die Kreuze gehören zu Ergebnissen von Bohnert [42], der Gewinnspektren durch Zweistrahlexperimente (siehe Abb.6), bei einer Anregungsintensität

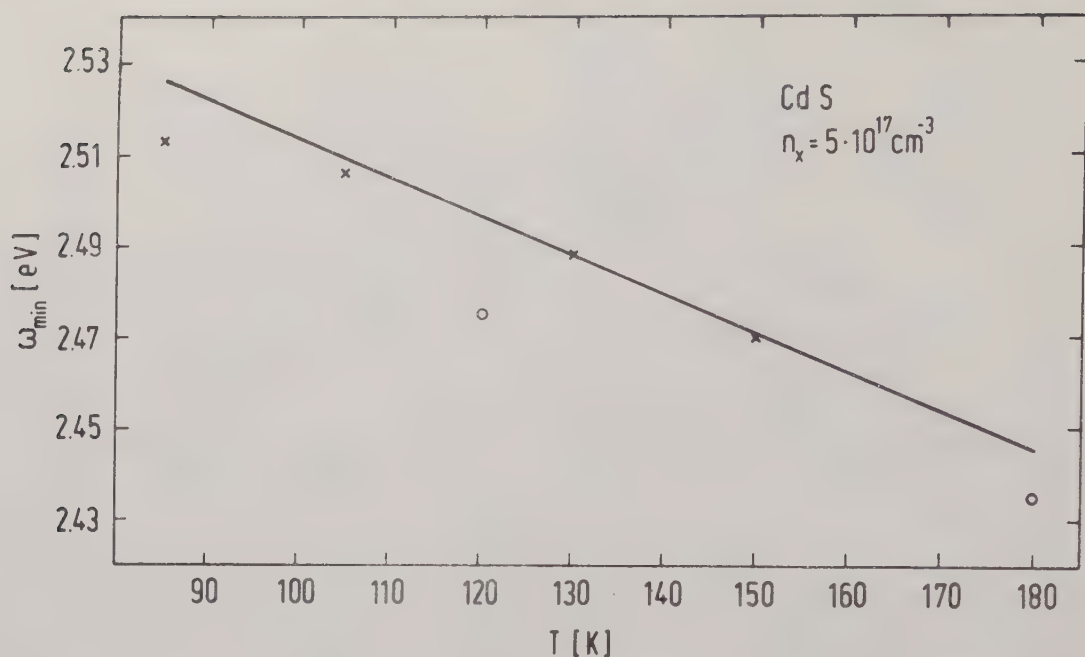


Abbildung 11. Temperaturabhängigkeit der Verstärkungsmaxima

von 1 MW cm^{-2} ausgemessen hat. Für solch hohe Intensitäten ist diese Methode vorzuziehen, da sehr kleine Schichten angeregt, und somit Sättigungseffekte vermieden werden können. Die Anregung geschieht in diesem Experiment auch durch Ein-Photonen-Absorption. Für Temperaturen größer als 100K ist eine sehr gute Übereinstimmung festzustellen.

Für Temperaturen unter 100K liegt das gemessene Maximum der Verstärkung um 13meV niedriger als das berechnete. Bei der Anregungsintensität von 1 MW cm^{-2} wird für tiefe Temperaturen Verstärkung durch Plasmarekombination gemessen [54,55]. Das Maximum der Plasmaverstärkung liegt bei gegebener Temperatur energetisch tiefer, als das Maximum der Verstärkung durch die Elektron-Exzitonrekombination. Aus dem Vergleich der berechneten - und gemessenen Spektren kann geschlossen werden, daß für Temperaturen unter

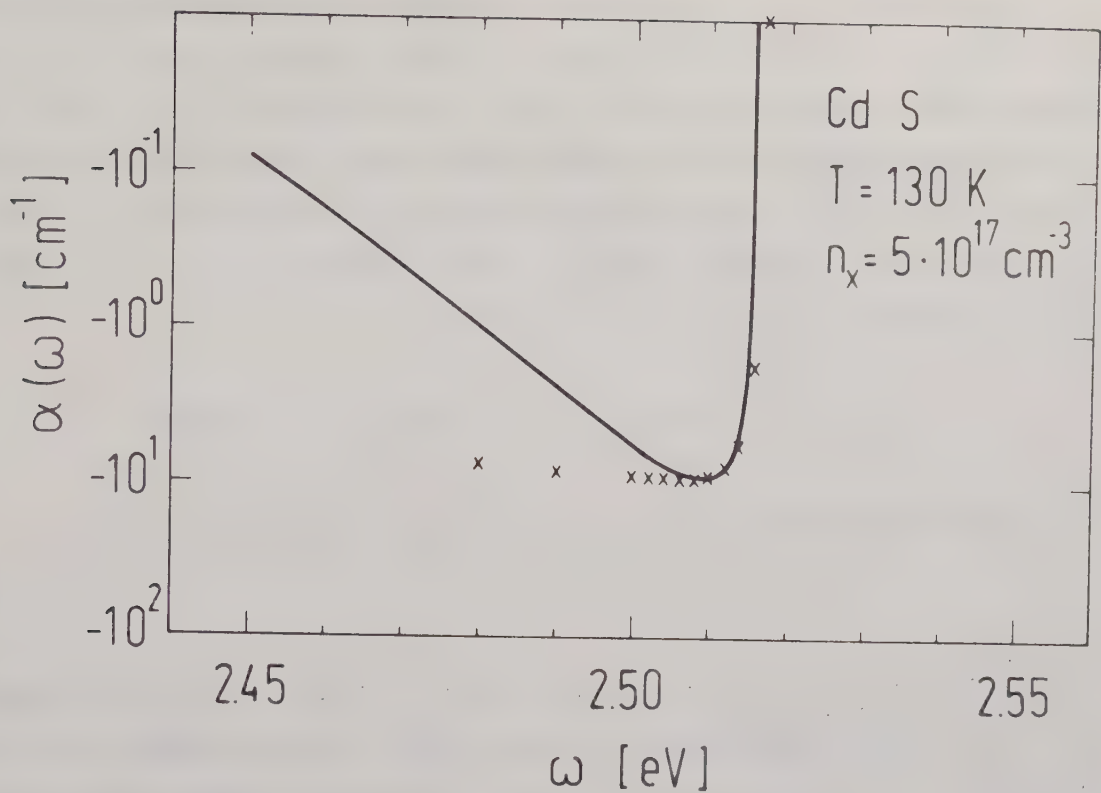


Abbildung 12. Vergleich eines berechneten und gemessenen Spektrums

100K die Plasmarekombination dominiert. Für Temperaturen oberhalb 100K ist die Elektron-Exzitonrekombination Ursache für das Auftreten optischer Verstärkung.

In Abb.12 wird ein berechnetes und gemessenes Spektrum verglichen. Die durchgezogene Linie stellt das bei $T=130\text{K}$ und einer Dichte von $n_x=5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ berechnete Spektrum dar. Die Kreuze markieren das von Bohnert [42] bei gleicher Temperatur und einer Anregungsintensität von 1 MW cm^{-2} gemessene Spektrum. Für das Maximum der Verstärkung und den Übergang zur Absorption herrscht gute Übereinstimmung, jedoch fällt das berechnete Spektrum zu niedrigeren Energien steiler ab. In dem berech-

neten Spektrum sind nur Beiträge der Elektron-Exziton-Streuung enthalten, so daß es bei Berücksichtigung anderer Prozesse wie z.B. die Elektron-Phonon-Wechselwirkung zu einer gewissen Verbreiterung kommt. Für die gemessenen Spektren muß berücksichtigt werden, daß im Kristall räumliche und zeitliche Inhomogenitäten der Dichte und der Temperatur auftreten, die zu einer Verbreiterung der Spektren führen. So gesehen sind die auftretenden Abweichungen nicht überraschend.

5.4 VERSTÄRKUNGSFUNKTION UND ABSORPTIONSKOEFFIZIENT

Qualitativ ähnliche Spektren wurden früher im Rahmen von Ratengleichungen für Polaritonen und Elektronen erhalten [20]. In diesen Rechnungen tritt die optische Verstärkung pro Zeit auf. Diese Verstärkungsfunktion kann durch den resonanten Beitrag des Imaginärteils der Exziton-Selbstenergie (168a) ausgerechnet werden.

$$(178) \quad g(\vec{p}, \omega) = - |C_{12} - C_{14}|^2 T_1^{e-x}(\vec{p}, \omega)$$

$|C_{12} - C_{14}|^2$ sind die Hopfield-Koeffizienten, die von der Transformation der Exzitonen ins Polaritonbild herrühren. $g(p, \omega)$ stellt eine Übergangswahrscheinlichkeit des Polaritons dar, und zwar vom exzitonartigen Zweig mit $p \neq 0$ zum photonartigen Zweig mit $p \approx 0$. So kann die negative Verstärkungsfunktion als Imaginärteil einer Polariton-Greenschen Funktion identifiziert werden.

$$(179) \quad T(\vec{p}, \omega) = -g(\vec{p}, \omega)$$

Um aus $\Gamma^1(p, \omega)$ den Absorptionskoeffizienten zu berechnen, muß die Polariton-Selbstenergie zurück in eine Photon-Selbstenergie transformiert werden. Aus dem Vergleich der Photon-Dyson-Gleichung

$$(180) \quad D(\vec{p}, z) = D_0(\vec{p}, z) + D_0(\vec{p}, z) \Pi^r(\vec{p}, z) D(\vec{p}, z)$$

und der Dyson-Gleichung eines Polaritons vom unteren Ast

$$(181) \quad P(\vec{p}, z) = P_0(\vec{p}, z) + P_0(\vec{p}, z) \Pi^l(\vec{p}, z) P(\vec{p}, z)$$

mit der Näherung

$$(182) \quad D(\vec{p}, z) = |C_{11} - C_{13}|^2 P^l(\vec{p}, z)$$

liefert einen Zusammenhang von Polariton- und Photon-Selbstenergie. $|C_{11} - C_{13}|^2$ sind die Hopfield-Koeffizienten (141). Diese tauchen durch die Transformation des Photons ins Polaritonbild auf. Der Zusammenhang zwischen Selbstenergie des Polaritons und des Photons ist gegeben durch:

$$(183) \quad \Pi^l(\vec{p}, z) = |C_{11} - C_{13}|^2 \Pi^r(\vec{p}, z)$$

Aus der Polariton-Selbstenergie (183) und deren Zusammenhang mit der Selbstenergie der Elektron-Exziton-Streuung (178, 179), läßt sich der Imaginärteil der Photon-Selbstenergie berechnen.

$$\begin{aligned}
 (184) \quad T^x(\vec{p}, \omega) &= \frac{|C_{12} - C_{14}|^2}{|C_{11} - C_{13}|^2} T_1^e(\vec{p}, \omega) \\
 &= \frac{\omega^2 \omega_0^2 \omega_p^x}{\omega_p^x (\omega^2 - (\omega_p^x)^2)^2} T_1^{e-x}(\vec{p}, \omega)
 \end{aligned}$$

Dieser Imaginärteil der Photon-Selbstenergie kann mit dem nichtstörungstheoretischen Resultat (157) verglichen werden. Wird die Exziton-Greensche Funktion in (157) bis in erste Ordnung entwickelt und nur der resonante Beitrag berücksichtigt, erhält man für die Photon - Selbstenergie:

$$(185) \quad \Pi_1^x(\vec{p}, \omega) = \frac{\omega^2}{2\omega_p^x} \frac{\omega_0^2}{\omega^2 - (\omega_p^x)^2} \left[1 + \frac{2\omega_p^x \Pi_1^{e-x}(\vec{p}, \omega)}{\omega^2 - (\omega_p^x)^2} + \dots \right]$$

Der Imaginärteil von (185) ist identisch zu Ergebnis (184). Allerdings bewirkt der Übergang von der Verstärkungsfunktion (178) zur Photon-Selbstenergie (184), das Auftreten eines Energienenners, der für ω^x eine starke Resonanz besitzt, die eine beachtliche Modifikation der Spektren in der Exziton-Resonanznähe hervorruft. Insbesondere kommt es zu einer Verschiebung der Verstärkungsmaxima zu höheren Energien, während die Breite der Spektren deutlich verringert wird.

Die Berechnung der optischen Eigenschaften durch eine dielektrische Funktion, in Verbindung mit der Variationsableitungsmethode für die Einteilchen-Greenschen Funktionen, führt auf ein sehr allgemeines Gleichungssystem der wechselwirkenden Photonen, Exzitonen und Elektronen. Dieses Gleichungssystem enthält für verschwindende Elektron - Exziton - Wechselwirkung U das Polariton, welches Hopfield [31] für das gekoppelte Exziton und Photon eingeführt hat. Die Auswertung des Gleichungssystems in einfachster nichttrivialer Näherung, liefert optische Spektren, die mit experimentellen Ergebnissen verglichen werden. Es wird die Dichte- und Temperaturabhängigkeit der Spektren berechnet. Die Temperaturabhängigkeit der Maxima der optischen Verstärkung sind für Temperaturen über 100K in sehr guter Übereinstimmung mit Ergebnissen aus Zweistrahlexperimenten an CdS von Bohnert et al [43]. Ein Vergleich des Absorptionskoeffizienten und der früher abgeleiteten zeitlichen Verstärkungsfunktion [20] bestätigt, daß die verwendete Methode ein nichtstörungstheoretisches Ergebnis liefert.

Eine Weiterentwicklung der Theorie ist auf verschiedenen Wegen denkbar. Zuerst sei auf einige verwendete Näherungen hingewiesen. Die Annahme, daß Exzitonen, Elektronen und Löcher im thermischen Gleichgewicht vorliegen, könnte fallengelassen werden. Anstelle der Boltzmannverteilungen könnten Bose-Einstein- und Fermi-Dirac-Verteilungen verwendet werden. Eine Fülle von Verbesserungen stecken natürlich im Gleichungssystem (Abb.4), wobei insbesondere auf die Berechnung eines nichtstörungstheoretischen Elektron-Exziton-Vertex Γ_4 hingewiesen werden soll.

Die wichtigste Erweiterung wäre der Einbau der Coulombschen Wechselwirkung zwischen den freien Ladungsträgern, die zu Abschirmungseffekten führt. Sicherlich wäre es dabei sinnvoll die Einführung von Exzitonen als Quasiteilchen zu vermeiden und direkt, das mit dem Lichtfeld wechselwirkende Elektron-Loch-System (46) zu untersuchen. Erst eine solche Theorie würde zeigen, für welche Materialparameter und welchen Dichte- und Temperaturbereich der hier behandelte Mechanismus dominiert.

7. REFERENZEN

- [1] E. Hanamura and H. Haug, Physics Reports 33c, 210 (1977)
- [2] H. Schrey and C. Klingshirn, phys.stat.sol. b 90, 67 (1978)
- [3] H. Saito, S. Sihionoya and E. Hanamura, Solid State Commun. 12, 227 (1973)
- [4] S. Shionoya, H. Saito, E. Hanamura and O. Akimoto, Solid State Commun. 12,223 (1973)
- [5] F. Bassani, J.J. Forney and A. Quattropani, phys.stat.sol. b 65, 591 (1974)
- [6] R.F. Leheny and J. Shah, Phys. Rev. Letters, 37, 871 (1976)
- [7] G. Beni and T.M. Rice, Phys. Rev. Letters 37, 874 (1976)
- [8] R. Zimmermann and M. Rösler, phys.stat.sol. b 75,633 (1976)
- [9] K. Bohnert, G. Schmieder, S. El-Dessouki and C. Klingshirn, solid state Commun. 27, 295 (1978)
- [10] C. Klingshirn and H. Haug, Physics Reports 70, 315 (1981)
315 (1981)
- [11] G.H. Wannier, Phys. Rev. 52, 191 (1973)

- [12] O. Madelung, Festkörpertheorie I, Springer Verlag, Berlin-Heidelberg-New York (1972)
- [13] R. Zimmermann, K. Kilimann, W.D. Kraeft, D. Kremp and G. Röpke, phys.stat.sol. b 90, 175 (1978)
175 (1978)
- [14] S. Schmitt-Rink, J.P. Löwenau and H. Haug, Z. Physik B 47, 13 (1982)
- [15] J.P. Löwenau, S. Schmitt-Rink and H. Haug, Phys. Rev. Letters 49, 1511 (1982)
- [16] S. Schmitt-Rink, J.P. Löwenau and H. Haug, K. Bohnert, A. Kreissl, K. Kempf and C. Klingshirn, Physica 117B+118B, 339 (1983)
- [17] C. Benoit a la Guillaume, J.M. Debever and F. Salvan, Phys. Rev. 177, 567 (1969)
- [18] J. Bille, T.Fischer, H.Liebing and W. Ruppel, 11th International Conference on Physics of Semiconductors, Warsaw, Poland 25-29 July (1972) p. 183-189
- [19] H. Liebing, P. Mengel and W. Ruppel, phys.stat.sol. b 72, 431 (1975)
- [20] H. Haug and S. Koch, phys.stat.sol. b 82, 531 (1977)
- [21] J.M. Hvam, Solid State Commun. 26, 373 (1978)

- [22] S.W. Koch, H. Haug, G. Schmieder, K. Bohnert and
C. Klingshirn, *phys. stat. sol. b* 89, 431 (1978)
- [23] J.M. Hvam, *J. Luminescence* 18/19, 312 (1979)
- [24] A. Cingolani, M. Ferrara and M. Lugara, *Optics Comm.* 34,
86 (1980)
- [25] E.F. Gross, S.A. Permogorov and B.S. Razbirin, *Sov. Phys.
Solid State* 8, 1180 (1966)
- [26] H. Haug, *J. Appl. Phys.* 39, 4687 (1968)
- [27] V.E. Mashehenko, *Opt. Spektrosk.* 42, 207 (1977)
- [28] B. Freienstein, *Diplomarbeit, Univ. Frankfurt* (1978)
- [29] H. Haug, R. März and S. Schmitt-Rink, *Phys. Lett. (Nether-
lands)*, 77 A, 287 (1980)
- [30] J.M. Hvam and A. Bivas, *phys. stat. sol. b* 101, 363 (1980)
- [31] J.J. Hopfield, *Phys. Rev.* 112, 1555 (1958)
- [32] H.M. Gibbs, S.L. McCall, T.N.C. Venkatesar, A.C. Gossard,
A. Passner and W. Wiegmann, *Appl. Phys. Lett.* 35, 45 (1979)
- [33] S.W. Koch and H. Haug, *Phys. Rev. Lett.* 46, 450 (1981)
- [34] H. Haug, S.W. Koch, R. Neumann and H.E. Schmidt, *Z. Phys. B* 49,
79 (1982)

- [35] H.E. Schmidt, S.W. Koch and H. Haug, Z. Phys. B 51, 85 (1983)
- [36] P.C. Martin and J. Schwinger, Phys. Rev. 115, 1342 (1959)
- [37] L.B. Kadanoff and G. Baym, Quantum statistical Mechanics,
W.A. Benjamin, New York (1962)
- [38] R. Kragler, Physica 102 A, 22 (1980)
- [39] G. Baym and L.P. Kadanoff, Phys. Rev. 124, 287 (1961)
- [40] R. Liebmann, Dissertation, Univ. Hamburg (1976)
- [41] G. Baym, Phys. Rev. 127, 1391 (1962)
- [42] K. Bohnert, Dissertation, Univ. Karlsruhe (1981)
- [43] K. Bohnert and C. Klingshirn, private Mitteilung
- [44] D. Pines and P. Nozieres, The Theory of Quantum Liquids,
Benjamin New York (1966)
- [45] G.D. Mahan, Many-Particle-Physics, Plenum Press, New York
(1981) p. 256
- [46] S. Schmitt-Rink and H. Haug, phys.stat.sol.b 108,377 (1981)
- [47] H. Haug, Z. Physik B 24, 351 (1976)
- [48] Fetter and Walecka, Quantum Theory of Many Particle Systems
Mc Graw-Hill, New York (1971)

- [49] A.A. Abrikosov, L.P. Gor'kov and I.YE. Dzyaloshinskii,
Quantum Field Theoretical Methods in statistical Physics,
Pergamon Student Edition (1965)
- [50] S. Doniach and E.H. Sondheimer, Green's Function for Solid
State Physicists,Frontiers in Physics,W.A. Benjamin (1974)
- [51] H. Haken, Quantenfeldtheorie des Festkörpers, B.G.Teubener
Suttgart (1973)
- [52] K.L. Shaklee and R.F. Leheny, Appl.Phys.Lett.18, 475 (1971)
- [53] K. Bohnert, G. Schmieder and C. Klingshirn, phys.stat.sol.
b 98, 175 (1980)
- [54] A. Kreissel, K. Bohnert, V.G. Lyssenko and C. Klingshirn,
phys.stat.sol. b 144, 537 (1982)
- [55] K. Bohnert, M. Anselment, G. Koppe and C. Klingshirn,
H. Haug, S.W. Koch, S.Schmitt-Rink, F.F. Abraham, Z. Phy-
sik 1 (1981)

8.1 A1

Lösen der Bewegungsgleichung des Elektron-Exziton-Vertex Γ_4 (108), bestimmt das Gleichungssystem der gekoppelten Photonen, Exzitonen und Elektronen (112-114). Γ_4 ist als zweifache Variationsableitung der Exziton-Einpunktfunktion E definiert. Um die Variationsableitung durchzuführen, wird in die Elektron-Dyson-Gleichung (99) gegangen, bei der die äußeren Felder noch endlich sind. Nach der Ableitung werden die äußeren Felder Null gesetzt und angenommen, daß keine Symmetriebrechung existiert. Dann verschwinden die Einpunktfunktionen und die Vertices mit ungeradem Index. Man erhält folgende Gleichung für den Elektron-Exziton-Vertex:

$$\begin{aligned}
 (A.1) \quad \Gamma_4(12,34) &= U(12,34) \\
 &+ i \{ U(11',-2'3) \mathcal{G}(1',4') E(6',2') \bar{\Gamma}_4(4'2,46') + (3 \longleftrightarrow 4) \} \\
 &+ \frac{i}{2} U(12,-1'2') E(2',3') E(4',1') \Delta_4(3'4',34) \\
 &- \frac{1}{2} U(11',-2'3') \mathcal{G}(1',4') E(6',2') \{ \bar{\Gamma}_4(4'8',34) \mathcal{G}(8',7') E(3',5') \bar{\Gamma}_4(7'2,-5'6') \\
 &\quad + 2 E(3',7') \Delta_4(7'8',34) E(8',5') \bar{\Gamma}_4(4'2,-5'6') \\
 &\quad + E(3',5') \bar{\Gamma}_6(4'2,-5'6',34)
 \end{aligned}$$

$$+ \left[2T_4(4'5', 36') E(3'8') G(5', 7') T_4(7'2, 4-8') \right. \\ \left. + E(3'5') \Delta_4(4'7', 36') E(7'8') T_4(4'2, 4-8') \right] + (3 \leftrightarrow 4) \}$$

8.2 A11

In der Bewegungsgleichung für den Vertex Γ_4 , tritt der höhere Vertex Γ_6 und die verallgemeinerte Exziton-Exziton-Wechselwirkung Δ_4 auf. Δ_4 (109) ist als zweifache Variationsableitung der inversen Exziton-Greenschen Funktion nach der Exziton-Einpunktfunktion E definiert. Ausführen der Variationsableitung in Gleichung (103) und anschließendes Abschalten der äußeren Felder, ergibt die Gleichung des Exziton-Exziton-Vertex:

$$(A.2) \quad \Delta_4(12, 34) = -i U(1'2', -12) G(2'3') G(4'1') T_4(3'4', 34) \\ - i \{ U(1'2', 3-1) G(5'1') G(2'4') T_4(4'5', 42) + (3 \leftrightarrow 4) \} \\ + U(1'2', 3'-1) G(5'1') G(2'4') E(3'6') \{ [T_4(4'8', 3-6') G(8', 7') T_4(7'5', 24) \\ + T_4(7'5', -6'3) G(8', 7') T_4(4'8', 24) \\ + T_4(4'5', -7'3) E(8', 7') \Delta_4(6'8', 24)] + (3 \leftrightarrow 4) \\ + G(8', 7') T_4(7'5', 34) T_4(4'8', 2-6') \\ + T_4(4'8', 34) G(8', 7') T_4(7'5', 2'-6') \}$$

$$+ \Delta_4(6'8',34) E(8,7') \overline{T}_4(4'5',2-7')$$

$$+ \overline{T}_6(4'5',2-6'34) \}$$

$$[\dots\dots] + (3 \leftrightarrow 4)$$

bedeutet: Es folgen die gleichen
Terme wie in der Klammer, jedoch
die Indizes 3,4 sind vertauscht.

DANKSAGUNG

Bei Herrn Prof. Dr. Haug möchte ich mich für die Möglichkeit bedanken, diese Arbeit an seinem Institut durchzuführen, für sein ständiges Interesse und für viele Anregungen und Diskussionen, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben..

Für wissenschaftliche Zusammenarbeit bedanke ich mich bei allen Institutsangehörigen. Erwähnt sei besonders Dr. R. Liebmann, der mir mit seiner Erfahrung über Vertexapproximationen behilflich war.

Prof. Dr. C. Klingshirn und Dr. K. Bohnert danke ich für ihr Interesse und für Diskussionen über die Ergebnisse dieser Arbeit.

Frau Boffo danke ich für das Zeichnen der Abbildungen.

Diese Arbeit ist Teilprojekt des Sonderforschungsbereiches 65 Frankfurt/Darmstadt und wurde von der Deutschen Forschungsgemeinschaft finanziert.

Zur Ausführung der numerischen Rechnungen stand mir Rechenzeit auf dem Computer der Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI) zu Verfügung.

Meine akademischen Lehrer waren: Bass, Haug, Hirst, Jelitto, Kerner, Kulze, Martienssen, Mohler, Müser, Reinhardt, Roesky, Schaarschmitt, Stummel.

LEBENS LAUF

Name: Rainer Lindwurm

Anschrift: Frankenallee 228
6000 Frankfurt/Main 1

geb.: 14.2.1950

Eltern: Friedrich Lindwurm
Ruth Lindwurm, geb. Hellmuth-Friker

1956/64 Volksschule, Linne-Schule in Frankfurt/M

1964/66 Gewerbliche Berufsfachschule (Metall)
Heinrich-Kleyer-Schule in Frankfurt/M

1966 Abschluß Fachschulreife

1966/69 Berufsausbildung als Maschinenschlosser
Firma Naxos-Union

1969 Erhalt des Facharbeiterbriefes

April 69/ Tätigkeit als Maschinenschlosser
Okt. 69 Firma Naxos-Union

- Okt.69/72 Technisches Gymnasium
Heinrich-Kleyer-Schule in Frankfurt/M
Abschluß Reifezeugnis des Techn. Gymnasiums
- 1972/73 Zivildienst, Bürgerhospital Frankfurt/M
- 1973 Im Wintersemester 1973 Beginn des
Physikstudiums an der
Johann Wolfgang Goethe-Universität
in Frankfurt/Main
- 1975 Diplom-Vorprüfung an der
Johann Wolfgang Goethe-Universität
- 1977 Ab Wintersemester 1977 Tätigkeit
als Tutor am Fachbereich Physik
Johann Wolfgang Goethe-Universität
- 1980 Diplom-Hauptprüfung an der
Johann Wolfgang Goethe-Universität
Institut für theoretische Festkörper=
physik,
Thema der Diplomarbeit: Zum Phasendiagramm
des hochangeregten Halbleiters.
- 1980 Wissenschaftlicher Mitarbeiter am
Institut für theoretische Festkörper=
physik an der
Johann Wolfgang Goethe-Universität
Beginn der Promotion, Thema der Promotions=
arbeit: Vielteilchentheorie der durch

Elektronen assistierten Exzitonrekombination.

Aug. 81 Heirat, Ehefrau Renate Lück-Lindwurm

Juni 82 Geburt der Tochter Andrea

Frankfurt/Main, den 15. Oktober 1983

